

DISCIPLINAS ELETIVAS
2º Semestre / 2022

DISCIPLINA	NOME
F 023	Tópicos de Física da Matéria Condensada III (Modelagem Computacional em estudos de Superfícies e Nanoestruturas Depositadas em Superfícies)

Horas Semanais						
Teóricas	Práticas	Laboratório	Orientação	Distância	Estudo em Casa	Sala de Aula
02	00	00	0	0	0	02
Nº semanas	Carga horária total		Créditos	Exame	Frequência	Aprovação
15	30		02	S	75%	S

Horário Proposto:

Terça-feira das 14h às 16h

Ementa:

RESUMO

A física tem se beneficiado imensamente das simulações computacionais que hoje se apresentam como um terceiro pilar juntamente com o a física teórica e a física experimental.

Em matéria condensada e mais recentemente em nanociência a contribuição das simulações tem causado um grande impacto e contribuído enormemente com o entendimento de experimentos e até com propostas de novas estruturas projetadas virtualmente e posteriormente verificadas experimentalmente.

O advento dos computadores durante a segunda guerra mundial trouxe junto novas propostas de estudos em física. De fato, as simulações computacionais já surgiram nesta época, com o método de Monte Carlo a Dinâmica Molecular.

O entendimento da matéria condensada através de simulações teve seu grande impacto com a proposta de Walter Kohn da teoria do funcional de densidade (DFT). Esta teoria torna possível o estudo de sólidos macroscópicos, superfícies, aglomerados, nanopartículas, nanofios e nanoestruturas em geral.

Este curso pretende apresentar estes tópicos de modelagem usando simulações computacionais e apresentar aplicações em nanociência, física de superfícies, física de clusters e supercondutores de baixa dimensionalidade entre outras aplicações.

CURSO DE POS-GRADUAÇÃO:

Este curso de pós-graduação que será ministrado dentro do programa de cursos da PG do IFGW, será apresentado em aulas semanais de 2 horas no segundo semestre de 2022, cobrirá alguns tópicos de metodologia de física computacional, como a teoria do funcional de densidade (DFT), a dinâmica molecular (DM) com potenciais efetivos e a dinâmica molecular com forças quânticas (AIDM). Estas são técnicas relevantes usadas em estudos de matéria condensada, física de superfícies (Surface Science) e nanociência, (clusters e nanofios) focalizando nos aspectos de maior interesse para estudantes de pós-graduação em física e química.

Objetivos:

Pré-Requisito na Graduação (se houver):

F604 e F689

Programa:

TÓPICOS DAS AULAS:

1. Introdução a Estudos de Caso, o que faremos neste curso.

DISCIPLINAS ELETIVAS
2º Semestre / 2022

2. Estados eletrônicos em sólidos

Teoria de Drude para metais, teoria de Sommerfeld para metais

3. Resumo sobre estados eletrônicos de sólidos.

Teorema de Bloch, condições de Born-von Karman. Densidade de estados

Trataremos os conceitos fundamentais os métodos elétron quase livre, e tight binding.

O problema do Exchange. O método do pseudopotencial empírico.

4. O problema de muitos corpos.

Determinantes de Slater, o método de Hartree, o método de Hartree Fock.

5. O

6. Aspectos básicos em interações partícula-superfície.

Trataram-se os conceitos básicos que serão utilizados posteriormente no curso. Em

particular, as diferenças entre fisorção e quimisorção, e como eles podem ser

descritos; identificação dos sítios mais favoráveis; o efeito do cobrimento superficial.

7. Óxidos metálicos como substratos sólidos.

Alguns métodos clássicos e tipos de cálculos mecânico quânticos serão discutidos como ferramentas adequadas para estudar superfícies em óxidos metálicos.

8. Metais alcalino terrosos sobre superfícies de TiO₂

A adsorção de metais alcalinos e alcalino terrosos sobre TiO₂ constituem um caso de estudo modelo em catálise heterogênea de promoção de materiais semicondutores.

9. Formação de cluster metálicos, experimentos e modelamento teórico.

10. Deposição de clusters

Revisaremos os aspectos importantes relacionados com a interação entre clusters metálicos e substratos de óxidos metálicos. Apesar de que os métodos computacionais estão ainda limitados a sistemas pequenos, eles proporcionam relevante informação no nível atômico.

11. Reatividade química sobre óxidos metálicos. Fotocatálise.

Muitos óxidos metálicos atuam como excelentes suportes para catalisar reações químicas. Por exemplo, a decomposição de álcool tem lugar sobre superfícies de TiO₂ rutilo com uma barreira energética mais reduzida devido a presença de defeitos pontuais. Algumas reações podem ser iniciadas com radiação eletromagnética UV/Vis recebendo o nome de fotocatálise. Assim, H₂O pode constituir uma fonte de H₂ produzido em superfícies de anatase sendo exposta a radiação visível.

12. Sistemas auto organizados sobre superfícies solidas

Auto-organização é um mecanismo recorrente na natureza para construir estruturas

DISCIPLINAS ELETIVAS
2º Semestre / 2022

complexas espontaneamente. Os cientistas tem tentado imitar este processo desenvolvendo diferentes técnicas *bottom-up*. Ilustraram se o papel dos métodos teóricos e uma compreensão da auto-organização modelada pelos suportes sólidos. Uso de biovidros para implantes ósseos.

13. Novos materiais, supercondutividade em bulk e em materiais 2D. O advento da supercondutividade teve grande evolução nas últimas três décadas e em particular neste novo século devido a evolução dos métodos computacionais, a chamada nova estrutura eletrônica, que associados as equações da supercondutividade proporcionam uma plataforma quantitativa para previsão de novos materiais supercondutores. Eletretos são uma nova classe de materiais supercondutores sendo estudadas.

14. Interfaces complexas.

Diferentes tipos de interfases de interesse industrial serão apresentadas e serão discutidos os métodos de modelagem mais adequados para seu estudo: Ceras sobre óxidos metálicos: a deposição e formação de películas de inibidores de corrosão nos condutos de gás e petróleo são processos fundamentais para a indústria cujo controle tem um custo muito elevado. As simulações atomísticas usando métodos clássicos revelam informação crucial para compreender estes sistemas complexos.

Titânio sobre silício: as interfaces de silício e metais de transição têm uma aplicabilidade grande na indústria microeletrônica. Mostra se como o uso de cálculos baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) permite obter informação sobre os mecanismos de crescimento de Ti sobre superfícies de silício.

Critérios de Avaliação (alunos de Graduação):

A avaliação do curso se dará pela participação dos alunos em atividades relacionadas com os tópicos ministrados sendo que cada aluno fará pelo menos uma apresentação de tema relacionado ao conteúdo discutido no curso.

Critérios de Avaliação (alunos de Pós-Graduação, no caso de oferecimento conjunto entre Graduação e Pós):

A avaliação do curso se dará pela participação dos alunos em atividades relacionadas com os tópicos ministrados sendo que cada aluno fará pelo menos uma apresentação de tema relacionado ao conteúdo discutido no curso.

Bibliografia:

Observações: