



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA

302001 – ESTRUTURA ELETRÔNICA E PROPRIEDADES DE SÓLIDOS E INTERFACES

CRÉDITOS: 04 (quatro) – 60 horas/aula

EMENTA: Abordagem de sólidos e redes cristalinas através do formalismo de espaço recíproco, teorema de Bloch e estrutura de bandas. É estudada a aplicação do formalismo utilizando a Teoria do Funcional da Densidade e cálculos de estrutura eletrônica com condições de contorno periódicas para cálculos de estrutura eletrônica e energia total de estados estendidos em sólidos; estrutura eletrônica e energia total de superfícies; modos vibracionais da rede cristalina. Finalmente, é abordada a estrutura eletrônica de estados localizados em sólidos.

PROGRAMA:

1. Sólidos e redes cristalinas:

- Condições de contorno periódicas;
- Vetores de rede e rede de Bravais e rede cristalina.

2. Espaço recíproco, teorema de Bloch e estrutura de bandas:

- Vetores do espaço recíproco;
- Zona de Brillouin;
- O Teorema de Bloch e suas consequências;
- Estados eletrônicos estendidos e estrutura de bandas.

3. Teoria do Funcional da Densidade e cálculos de estrutura eletrônica com condições de contorno periódicas:

- Apresentação da Teoria do Funcional da Densidade;
- Potenciais de troca e correlação;
- Bases de ondas planas e pseudopotenciais.

4. Estrutura eletrônica e energia total de estados estendidos em sólidos:

- Relações entre energia total, geometria e parâmetros de rede;
- Obtenção e análise de estrutura de bandas.

5. Estrutura eletrônica e energia total de superfícies:

- Camada de vácuo e de camada de átomos;
- Energia de superfícies.

6. Modos vibracionais da rede cristalina:

- Conceito de fônon;
- Cálculo da estrutura fônons em sólido simples.

7. Estrutura eletrônica de estados localizados em sólidos:

- Defeitos e dopantes;
- Potencial de Madelung;
- Modelos de aglomerados embebidos.

BIBLIOGRAFIA:

1. LEVINE, I.N. Quantum Chemistry. Prentice-Hall, 1991.
2. VIANNA, J.D.M.; CANUTO, S.; FAZZIO, A. Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos. Livraria da Física, São Paulo, 2004.
3. LESTER, J.N.; BIRKETT, J.W. Microbiology and Chemistry for Environmental Scientists and Engineers. 2.ed. E & FN SPON, 1999.
4. MANAHAN, Stanley E. Environmental Chemistry. 8.ed. CRC Press, 2005.

Prof. Dr. Renato Camargo Matos

Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Química
Universidade Federal de Juiz de Fora



Documento assinado eletronicamente por **Renato Camargo Matos, Coordenador(a)**, em 25/11/2022, às 18:11, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no Portal do SEI-Ufjf (www2.ufjf.br/SEI) através do ícone Conferência de Documentos, informando o código verificador **1008892** e o código CRC **25B2AE20**.