

**DISCIPLINAS ELETIVAS**  
**1º Semestre / 2017**

DISCIPLINA	NOME
F 023	Tópicos de Física da Matéria Condensada III

Horas Semanais						
Teóricas	Práticas	Laboratório	Orientação	Distância	Estudo em Casa	Sala de Aula
2	0	0	0	0	0	2
Nº semanas	Carga horária total		Créditos	Exame	Frequência	Aprovação
15	30		2	S	75%	N

Horário Proposto:
Quarta : 14 - 16h00

Ementa:

## **Modelagem Computacional em estudos de Superfícies e Nanoestruturas Depositadas em Superfícies**

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 da modelagem computacional 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 de será ministrado dentro do programa de cursos da CG do IFGW, será apresentado em aulas semanais de 2 horas no primeiro semestre de 2017, 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 graduação e pós-graduação em física e química.

**DISCIPLINAS ELETIVAS**  
**1º Semestre / 2017**

**Objetivos:**

**Pré-Requisito na Graduação (se houver):**

**Mecânica Quântica -I**

**Programa:**

**TÓPICOS DAS AULAS:**

1. Introdução a Estudos de Caso, o que faremos neste curso.
2. Resumos sobre estados eletrônicos de sólidos.
3. O problema de muitos corpos.
4. A teoria do funcional de densidade (DFT) , suas razões e seus sucessos.
5. Dinâmica Molecular, onde usar.
6. Aspectos básicos em interações partícula-superfície.
7. Óxidos metálicos como substratos sólidos.
8. Metais alcalino terrosos sobre superfícies de  $\text{TiO}_2$
9. Formação de cluster metálicos, experimentos e modelamento teórico.
10. Deposição de clusters
11. Reatividade química sobre óxidos metálicos. Fotocatálise.
12. Sistemas auto organizados sobre superfícies solidas
13. Biomimetics: Projeto (design) de materiais naturais
14. Interfaces complexas.

**DISCIPLINAS ELETIVAS**  
**1º Semestre / 2017**

**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:**

- Será apresentada durante o curso.

**Observações:**