

## **FI204C - Tópicos de Física da Matéria Condensada I - "Uso de Métodos de Simulação Atômica no Estudo de Materiais"**

Resumo:

O uso de métodos computacionais tanto clássicos como quânticos está se tornando uma ferramenta indispensável no estudo de materiais.

Neste curso serão apresentados diferentes problemas atuais em Ciência de Materiais e serão discutidos os métodos de cálculo mais apropriados no estudo de propriedades de interesse. Sem nenhum conhecimento prévio, o curso pretende expor os fundamentos dos métodos computacionais mais usados na literatura a partir de problemas atuais de relevância.

Em particular, alguns dos tópicos apresentados são: propriedades estruturais de materiais sólidos; fenômenos de adsorção em superfícies sólidas; interfaces complexas; sistemas auto-arranjados; reatividade química; catálises heterogênea; foto-catálise; células solares. Assim, serão abordados métodos atômicos clássicos como a dinâmica molecular, e também métodos quânticos baseados na teoria do funcional da densidade (DFT) que aproveitam as condições de contorno periódicas para simular sistemas sólidos.