



Ementas de Disciplinas Eletivas

1° semestre de 2017

FI282 - Turma "A" - Tópicos em Ciência dos Materiais II

“Modelagem Computacional em estudos de Superfícies e Nanoestruturas
Depositadas em Superfícies”

Prof. Responsável: Edison Zacarias da Silva

Créditos: 2

Horário: 4ª - 14:00 às 16:00 h

Sala: IF14

Ementa:

RESUMO

A física tem se beneficiado imensamente das simulações computacionais que hoje se apresentam como um terceiro pilar juntamente com 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.

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 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 pós-graduação em física e química.

TÓPICOS DAS AULAS:

1. Introdução a Estudos de Caso, o que faremos neste curso.
2. Resumos sobre estados eletrônicos de sólidos.

Trataremos os conceitos fundamentais os métodos elétron quase livre, e tight binding. O problema do Exchange. O método do pseudopotencial empírico.

3. O problema de muitos corpos.

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

4. A teoria do funcional de densidade (DFT) , suas razões e seus sucessos.

A teoria do funcional da densidade mudou o panorama da pesquisa de materiais, da física a química e até a biologia sua aplicação permite estudos quantitativos e é uma teoria com capacidade de prever novos materiais. Aqui apresentaremos seus resultados principais.

5. Dinâmica Molecular, onde usar.

A dinâmica molecular surgiu junto com os computadores, e tem se provado uma abordagem fundamental para o entendimento de muitos problemas. Permite estudos em temperaturas finitas e um grande número de partículas.

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 TiO_2

A adsorção de metais alcalinos e alcalino terrosos sobre TiO_2 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 fotocatalise. 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 complexas espontaneamente. Os cientistas tem tentado imitar este processo desenvolvendo diferentes técnicas *bottom-up*. Ilustraram se o papel dos métodos teóricos em uma compreensão do auto-organizado modelado pelos suportes sólidos.

13. Biomimetics: Projeto (design) de materiais naturais

A cutina é o biopoliéster mais abundante na natureza e ela é o principal componente da cutícula da planta que protege os frutos e as folhas frente impactos biológicos, químicos e físicos. A combinação de técnicas teóricas e experimentais permite simular este sistema complexo a partir de monômeros sintéticos simples.

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.

AVALIAÇÃO DO CURSO

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.