

2º SEMESTRE DE 2022

FI282 - Tópicos em Ciência dos Materiais II - "Modelagem Computacional em estudos de Superfícies e Nanoestruturas Depositadas em Superfícies"

Turma

A

Créditos

2

Horário

Terça - 14h às 16h na sala IF14

Docente

Edison Zacarias da Silva

Pre-Requisitos

-

Objetivos

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 e 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.

Ementa:

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 (AIMD). 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.

Conteúdo Programático:

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

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. 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 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 atômicas usando métodos clássicos revelam informação crucial para compreender estes sistemas complexos.



INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN"
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA



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.

Bibliografia

Avaliações

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.