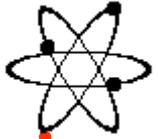




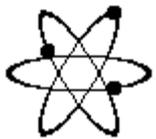
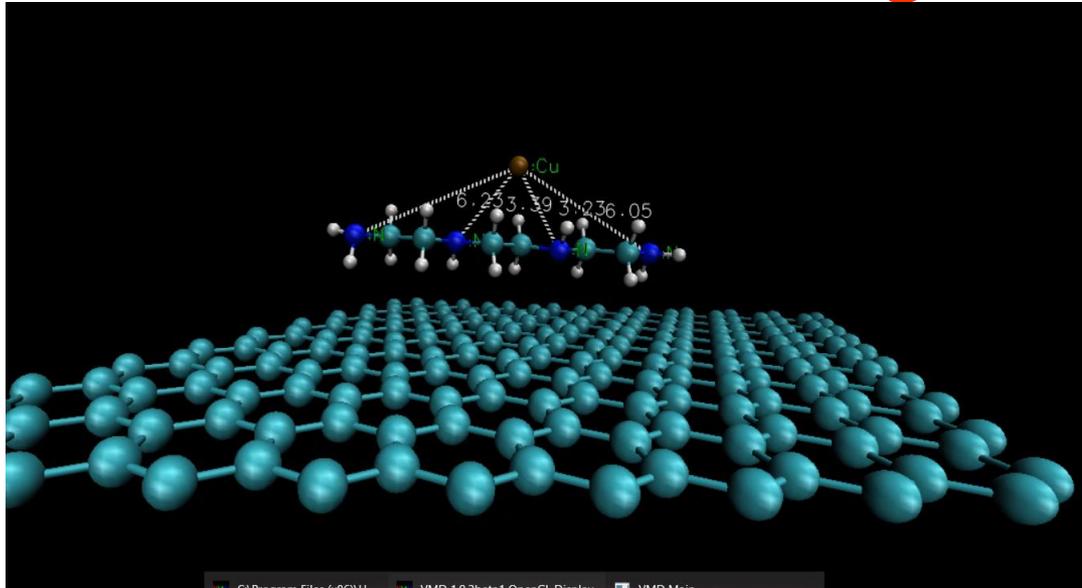
Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA)



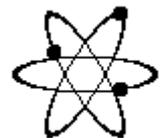
XIII ENCONTRO DE FÍSICA DO ITA-2019



"Simulações computacionais: um laboratório virtual de nanotecnologia"



Marcelo Marques
Ivan Guilhon



Grupo de Materiais Semicondutores e Nanotecnologia-GMSN
Departamento de Física-ITA

Antes de mais nada, o contexto do curso.....



Bem-vindo ao site do GMSN | Gr x +

Não seguro | www.gmsn.ita.br

Grupo de Materiais Semicondutores e Nanotecnologia

GMSN

Home

Língua/Language

- English
- Português

Apresentação do Grupo

- Pessoas
- Fotos
- Artigos
- Trabalhos concluídos
- Trabalhos em andamento
- Notícias

DFT-1/2

- Usando o método LDA-1/2

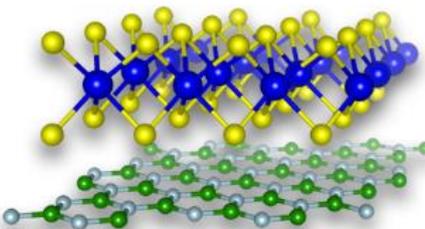
Bem-vindo ao site do GMSN

O Grupo de Materiais Semicondutores e Nanotecnologia-GMSN do ITA desenvolve pesquisas teóricas na área de Física da Matéria Condensada, realizando simulação de novos materiais. A pesquisa realizada no GMSN está voltada principalmente para a compreensão das propriedades estruturais e eletrônicas de sólidos e nanoestruturas. Entre nossos projetos atuais, gostaríamos de destacar: Estudo das propriedades de diferentes materiais bidimensionais 2D, estudo de ligas semicondutoras, isolantes topológicos e desenvolvimento de metodologia para o estudo de estados excitados.

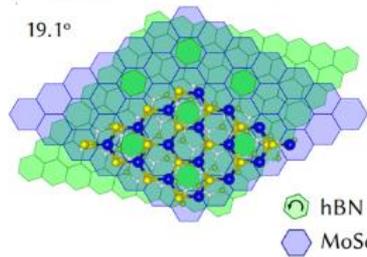
Materiais Bidimensionais (2D)

Materiais bidimensionais estão atualmente na vanguarda das pesquisas tecnológicas, prometendo revolucionar a eletrônica. O primeiro deles, o grafeno, que consiste de uma única camada de grafite, têm sido o foco de diversos estudos na área de nanotecnologia e novos materiais. Contudo, o fato do grafeno possuir um gap nulo, impõe dificuldades no seu uso para a eletrônica, o que provocou uma pesquisa intensa por materiais similares, porém com *gap*, dando origem a uma nova classe de materiais conhecidos como "materiais 2D". O GMSN realiza

- simulações destes materiais
- estudo de ligas de materiais 2D
- estudo de interfaces de materiais 2D num mesmo plano
- estudo de heteroestruturas de van der Waals
- mudança de suas propriedades sob tensão e campo elétrico

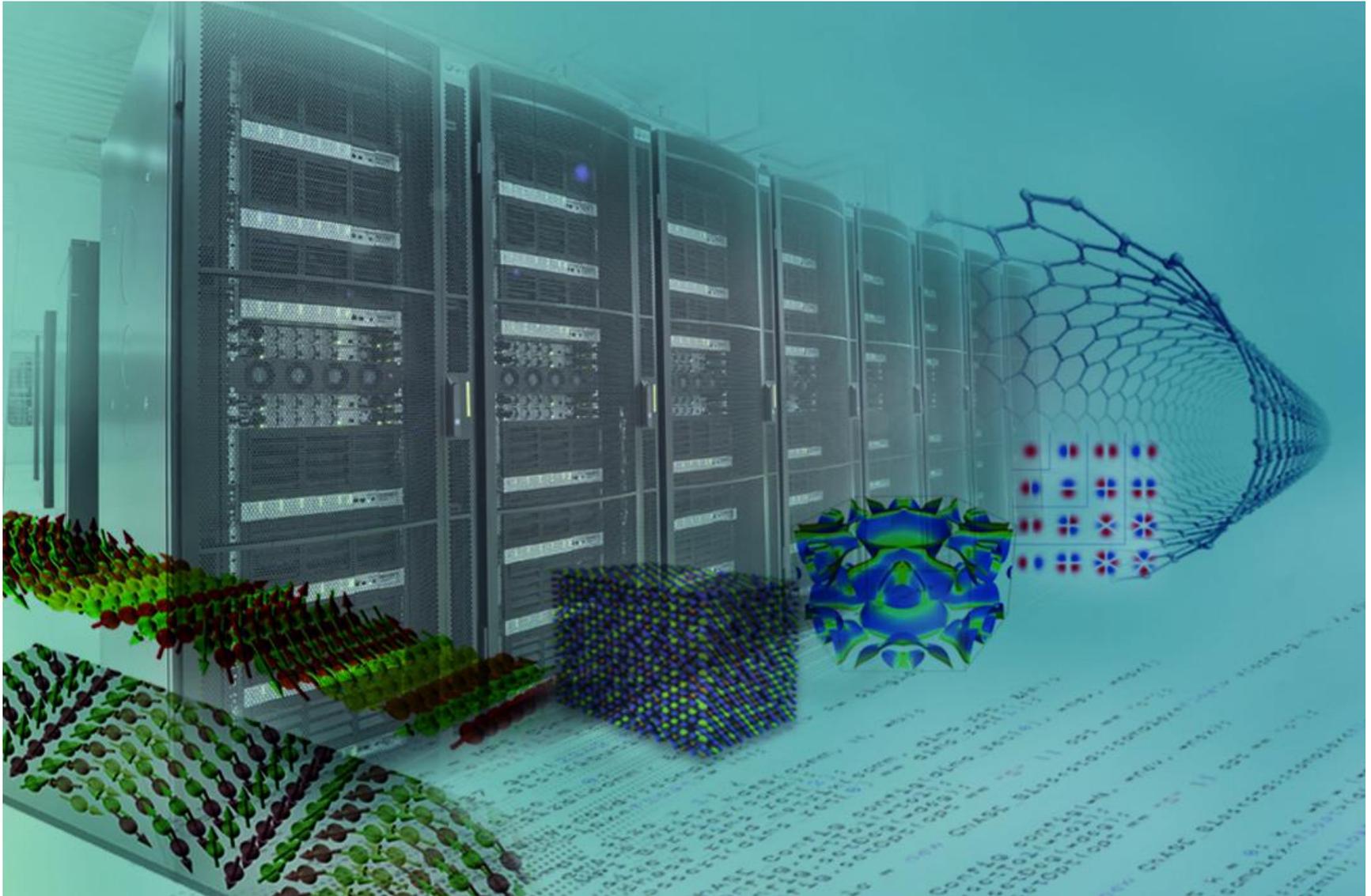


19.1°



hBN
MoSe₂

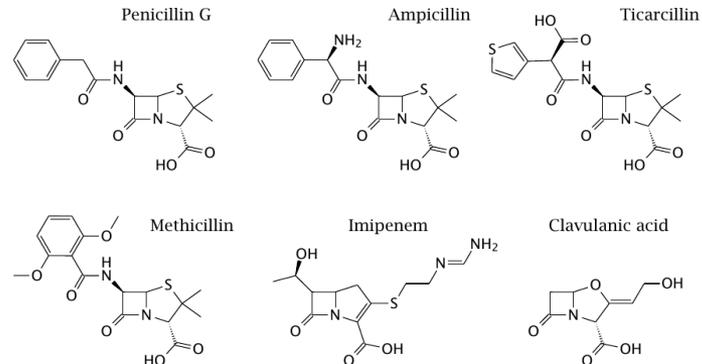
Será que é possível simular a matéria no computador ?



https://www.fz-juelich.de/ias/jsc/EN/AboutUs/Organisation/ComputationalScience/Simlabs/slqm/_node.html

Os mais variados tipos?

Antibióticos



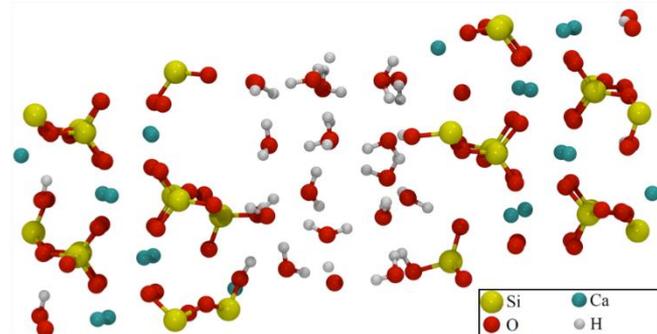
<https://thesagenews.com/4442/opinion/antibiotics-helpful-or-hurtful/>

<https://watcut.uwaterloo.ca/webnotes/Pharmacology/AntimicrobialChemotherapy.html>

concreto



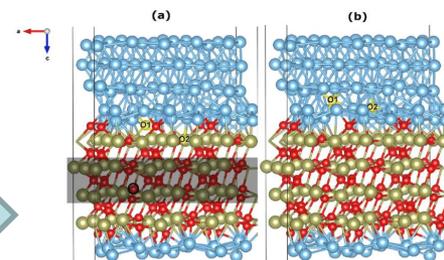
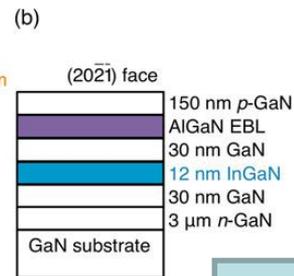
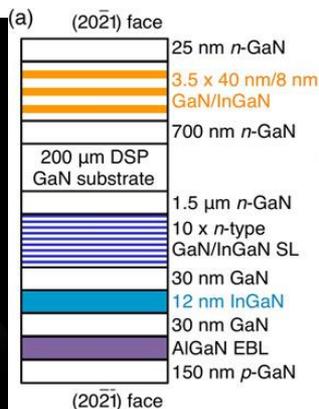
A matéria é formada pela junção de um monte de "coisinhas pequenas"



Tobermorite 9Å with a 0.6 nm layer of water

http://pesquisa.ufabc.edu.br/nanopetro/?page_id=503

Iluminação moderna

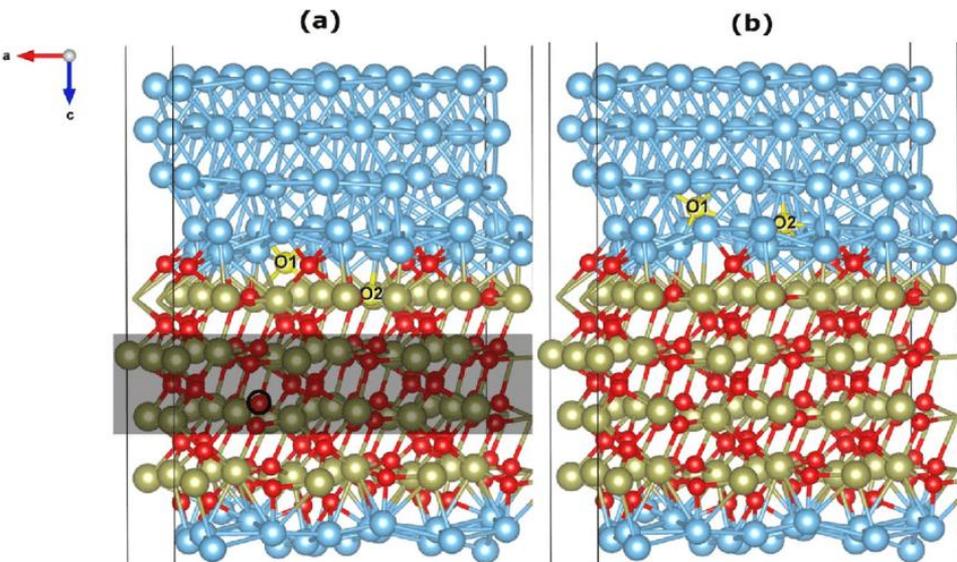


https://www.researchgate.net/figure/Structure-of-the-constructed-Ti-HfO-2-interface-model-a-Interface-model-with-O-atoms_fig1_322257928

http://www.semiconductor-today.com/news_items/2015/oct/ucsb_011015.shtml

<https://www.gorecon.com/products/59/921-912-906-T15-Style-LED-Bulbs>

Pode ter certeza, este desafio é imenso !!!!



(1) Como estas "coisinhas pequenas" funcionam e interagem é muito complicada, ate meio maluco....



(2) Em geral, o numero destas de "coisas "que interagem é imenso !

$$6 \times 10^{23}$$

602,000,000,000,000,000,000,000

O que veremos no curso



1º dia-

(a) Introdução ao problema, Mecânica Quântica, Física da matéria condensada e *Density Functional Theory (DFT)*

(b) Resolução do átomo com *DFT* e a ideia de meia ocupação para calcular a energia de ionização

2º dia-

(a) Teoria quântica para sólidos

(b) Cálculo de propriedades de sólidos de *DFT-1/2*

Conselho: este material estará disponível pra vocês, não se estressem e aproveitem o curso tranquilamente !

O mundo esta mudando muito rápido!



<http://www.quedelicianegente.com/2014/10/especial-30-brinquedos-que-marcaram.html>

Principal fonte de riqueza antigamente



<http://www.petroleumindustryreview.com/2015/08/u-s-adds-russian-oil-field-to-sanctions-list-reuters/>



<http://pcwallart.com/wheat-field-wallpaper-2.html>



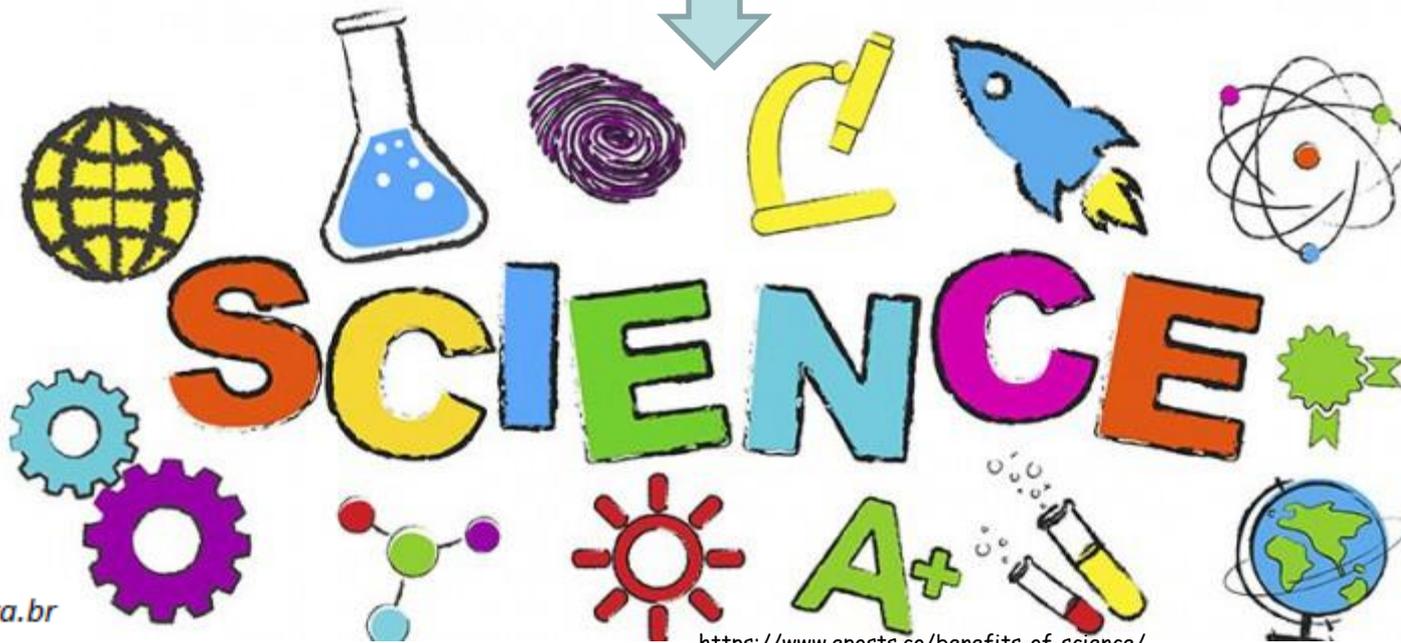
<http://www.mastersoftrivia.com/blog/2011/05/10-gold-mining-facts-you-may-not-be-aware-of/>

Principal fonte de riqueza atualmente: conhecimento



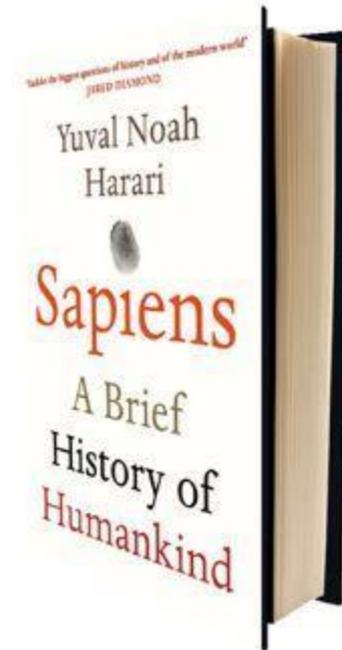
<http://hornercoaching.com/gaining-knowledge/>

Melhor tradução



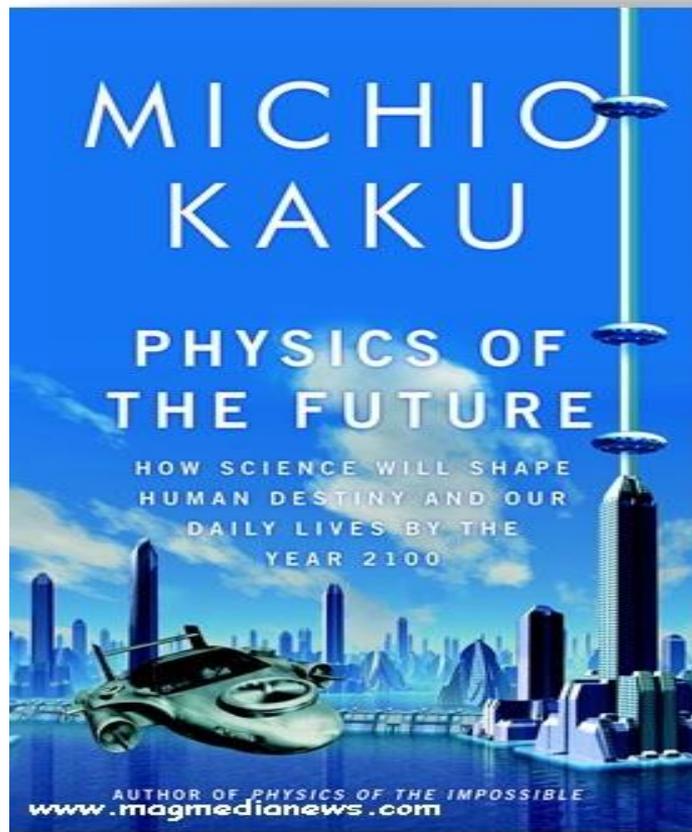
www.gmsn.ita.br

<https://www.eposts.co/benefits-of-science/>



<http://sp.olx.com.br/sao-paulo-e-regiao/livros-e-revistas/livro-sapiens-uma-breve-historia-da-humanidade-yuval-noah-harari-novo-309289322>

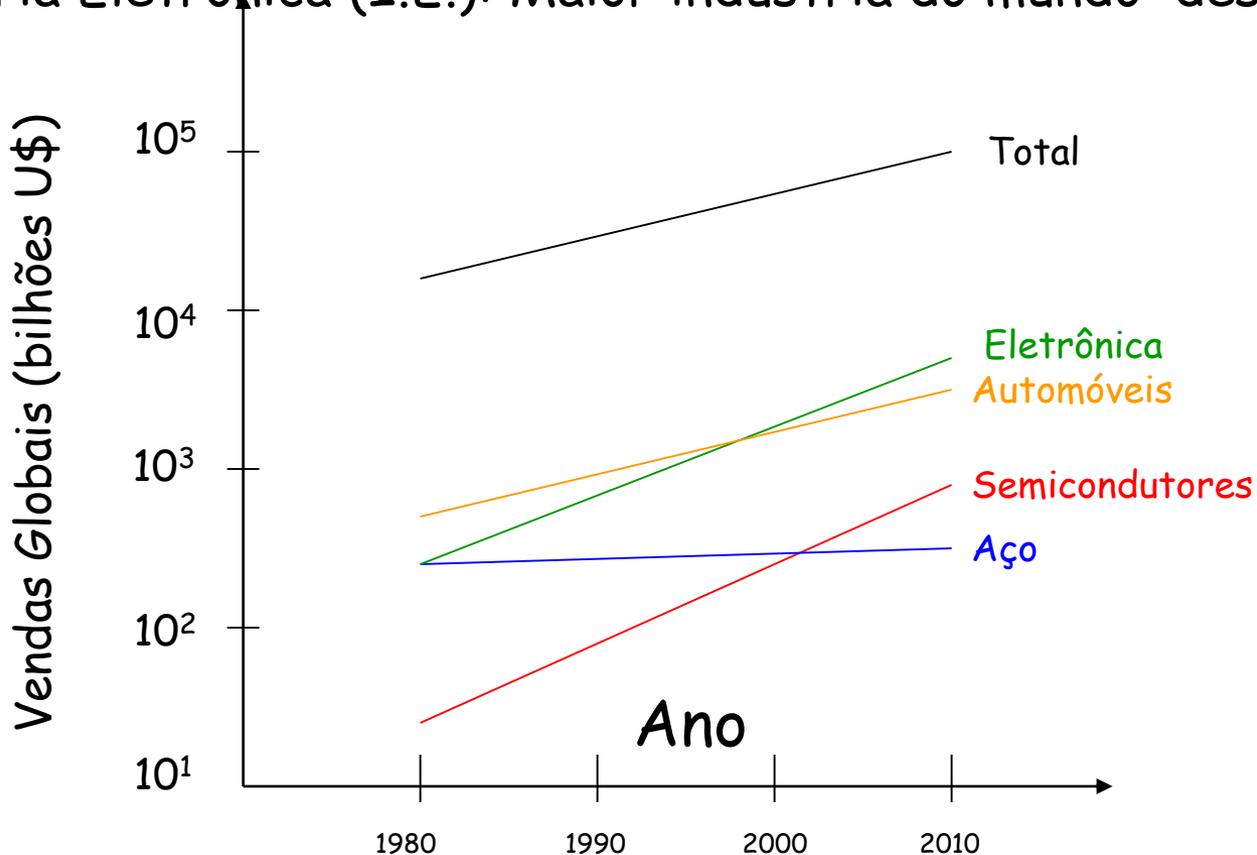
"A conexão forjada entre ciência e tecnologia é tão forte que hoje as pessoas tendem a confundir as duas. Tendemos a pensar que é impossível desenvolver novas tecnologias sem pesquisas científicas e que pesquisas tem pouco sentido se não resultam em novas tecnologias"



"A chave para compreender o futuro é entender as leis fundamentais da natureza e, em seguida, aplicá-las a invenções, máquinas e terapias que redefinirão nossa civilização num futuro longínquo "

A forma mais clara de demonstrar esta afirmação.....

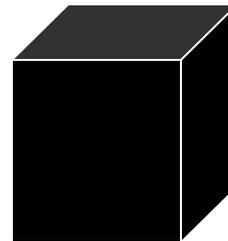
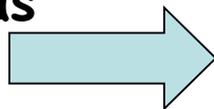
⚙ Indústria Eletrônica (I.E.): Maior indústria do mundo desde 1998 !



O que esta industria faz?

Essa industria produz caixas pretas "mágicas"

www.gmsn.ita.br



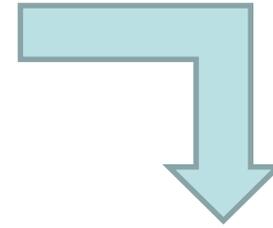
São construídas com altíssimas taxas de conhecimento (ciência sofisticadíssima...)

areia

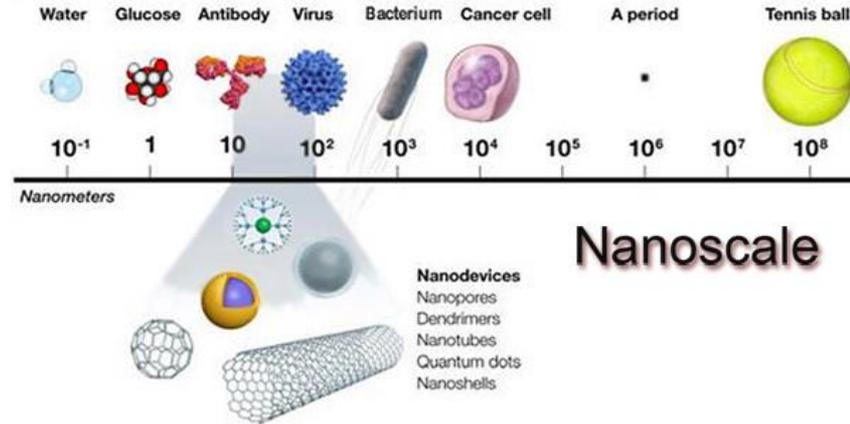


+

Capacidade humana



Física na escala atômica



Caixa Preta: Como fazer?

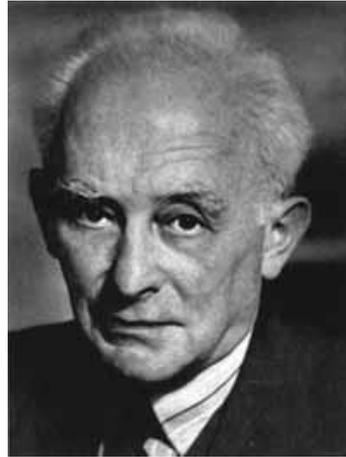


No entanto este conhecimento não foi fácil de ser obtido. Ele é incrivelmente distante da realidade que nos cerca...

Quem desvendou isso: ~1926 temos a **Mecânica Quântica**



Schroedinger



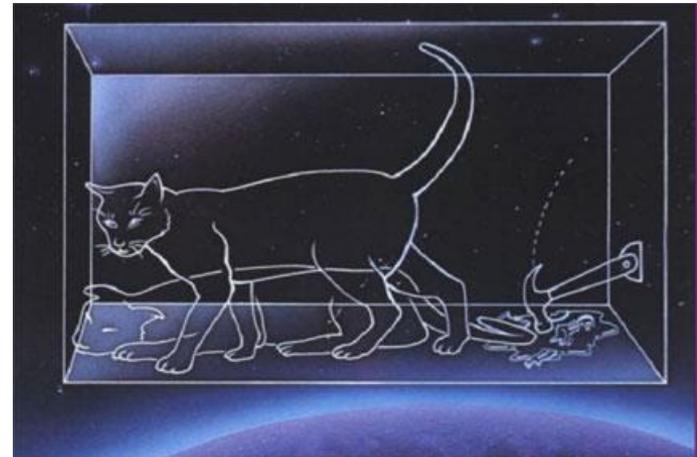
Born



Heisenberg

⇒ Descrição consistente do comportamento da matéria em uma "escala pequena"

⇒ Coisas estranhas podem acontecer.....

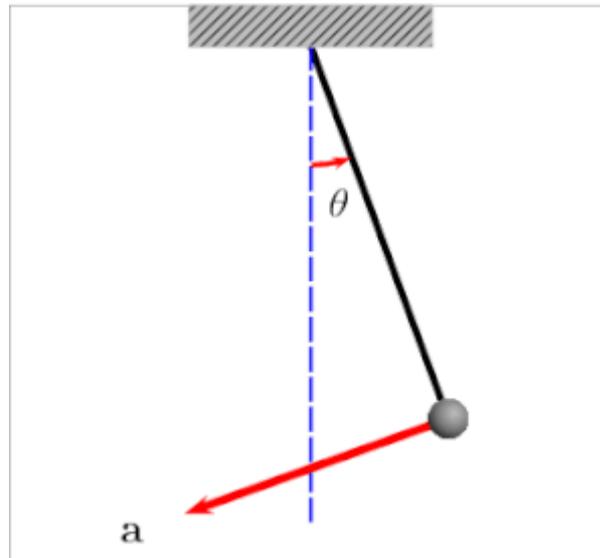


E ela apresenta uma mudança radical na física que era conhecida!



<https://www.keithrn.com/2013/12/radical-transformation-mission-possible-series-1/>

Mecânica clássica



[https://en.wikipedia.org/wiki/Pendulum_\(mathematics\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Pendulum_(mathematics))

Dado estado inicial:
(posição e velocidade)

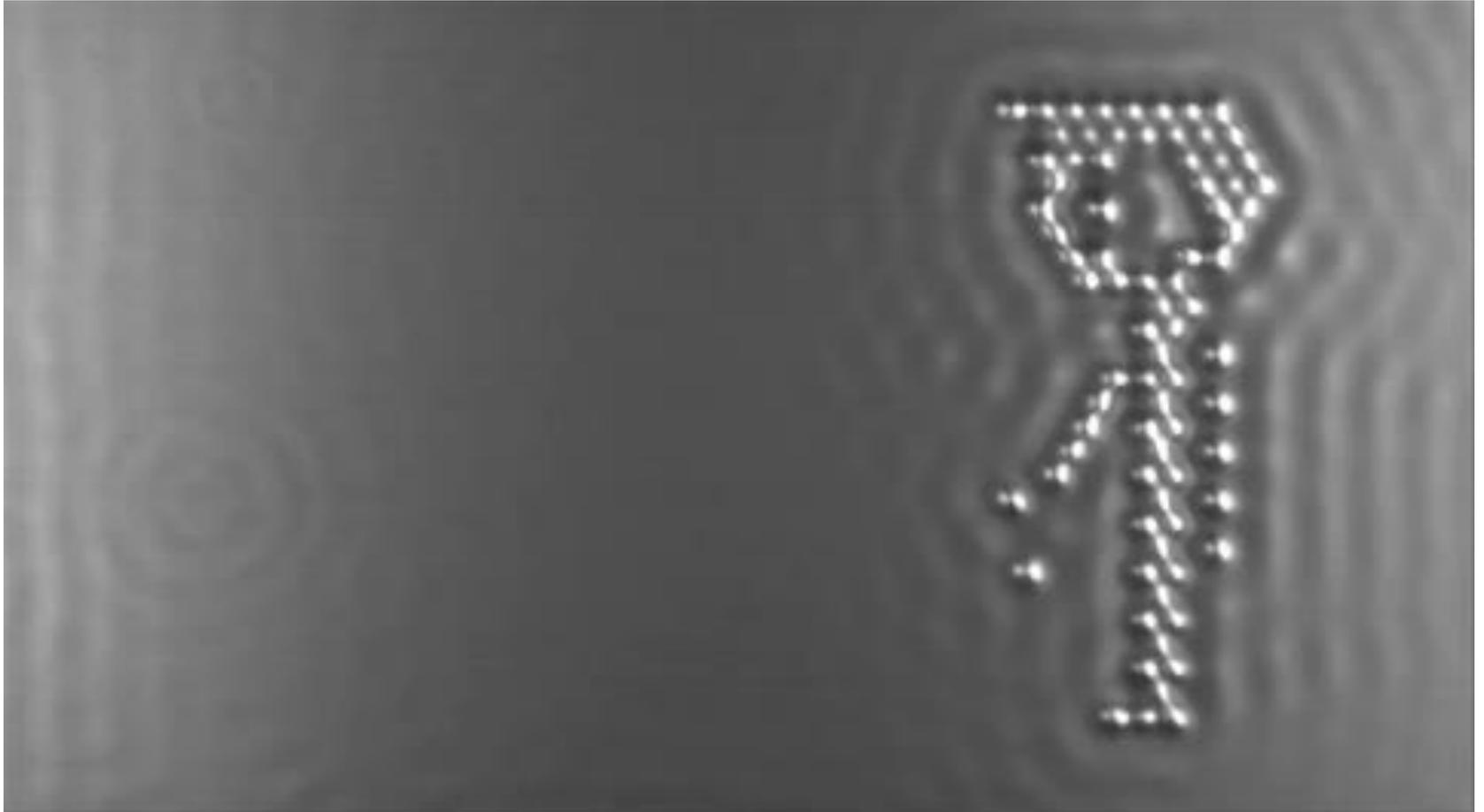
+

Dinâmica (Força)



Estado final
(outro instante
qualquer)

No entanto, descobriu-se que esta formulação não funciona no mundo muito pequeno !



Princípio da incerteza de Heisenberg



"The more precisely the position is determined, the less precisely the momentum is known in this instant, and vice versa."

--Heisenberg, uncertainty paper, 1927



http://simple.wikipedia.org/wiki/Heisenberg's_uncertainty_principle

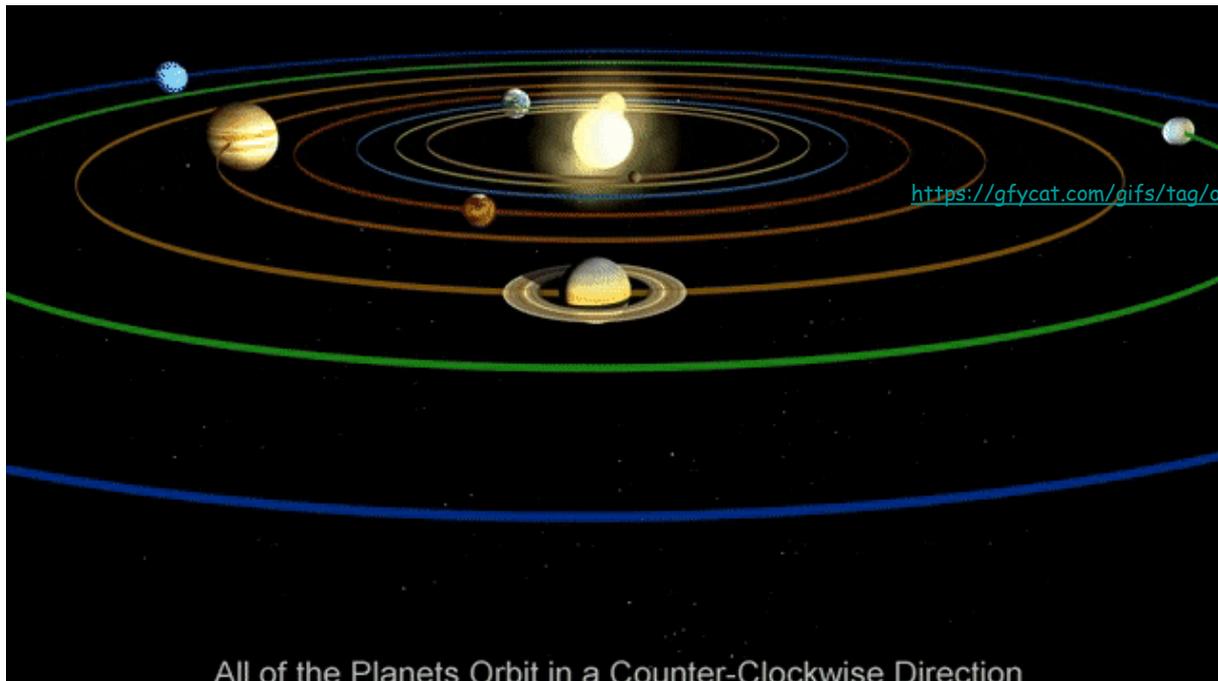
$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Não consigo definir o presente

Quanto mais prever o futuro!



Ou seja, foi pro beleleu a descrição Clássica do mundo !



All of the Planets Orbit in a Counter-Clockwise Direction

Ok, mas como então se define o estado em mecânica quântica?

$$1 \times 1 = 1$$

$$(-1) \times (-1) = 1$$

$$\xi \times \xi = -1$$

$$\xi = ?$$

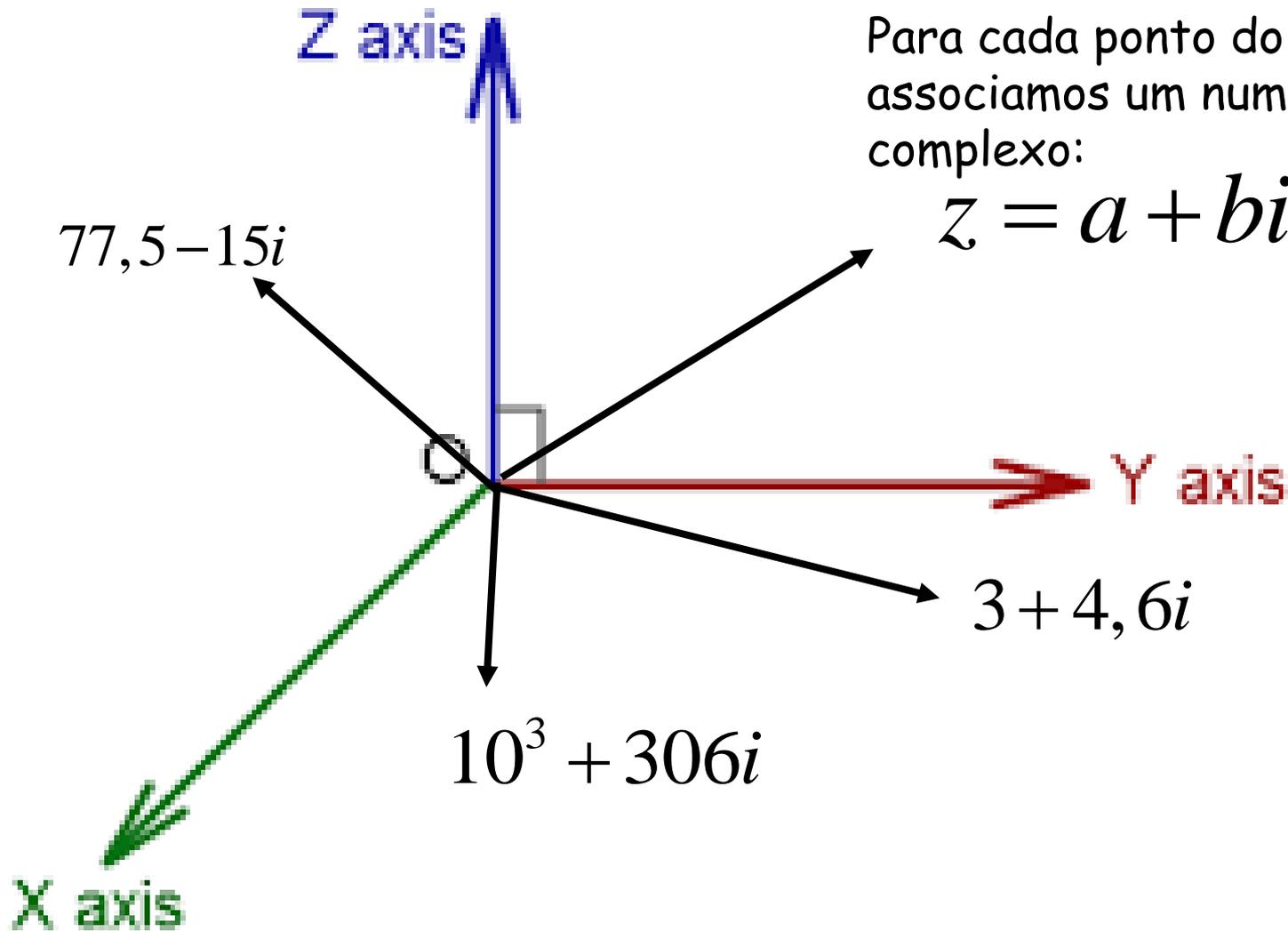
Jogamos nosso desconhecimento debaixo do tapete $\xi = i$

Um número geral $z = a + bi$

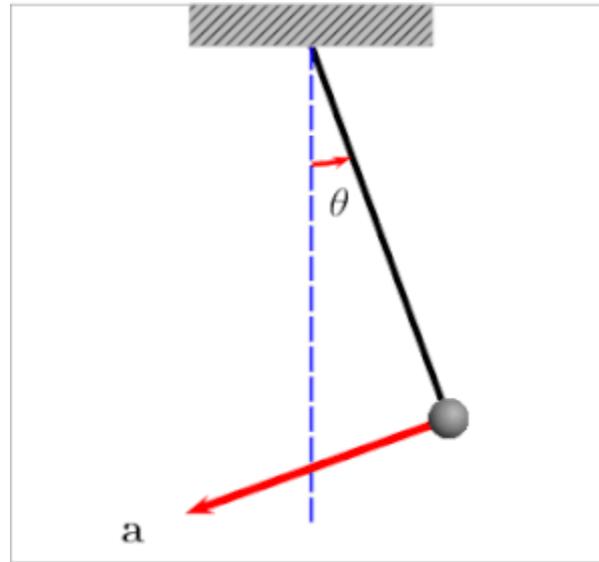
Ok, isso eu já sei professor, e abstrato demais, nem sei pra que serve, mas o que isso tem a ver com o estado do elétron ?????

Pois é.....

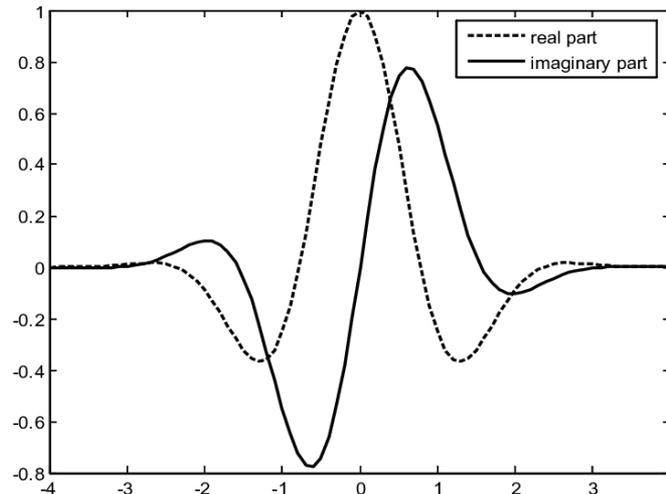
Melhor representação para uma partícula como um elétron (pasmem !)
é dada da seguinte forma



Passamos de uma descrição visualizável e concreta



A uma descrição abstrata demais e muito longe da realidade palpável!



Essa "função complexa" definida no espaço todo e que pode variar no tempo chamamos de **função de onda**



Ela contém **toda informação** sobre a partícula!



Usamos a palavra **onda**, pois é disso mesmo que se trata !

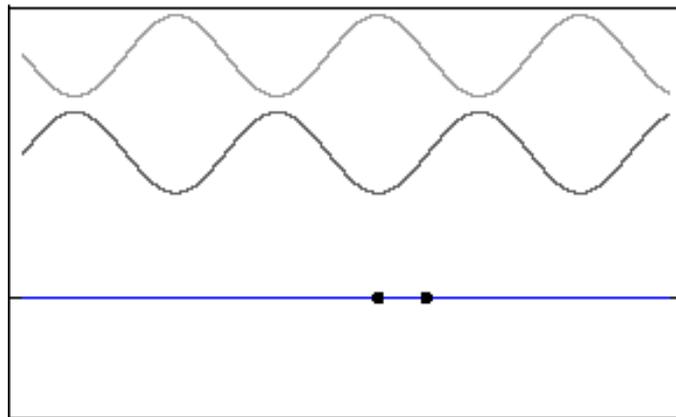
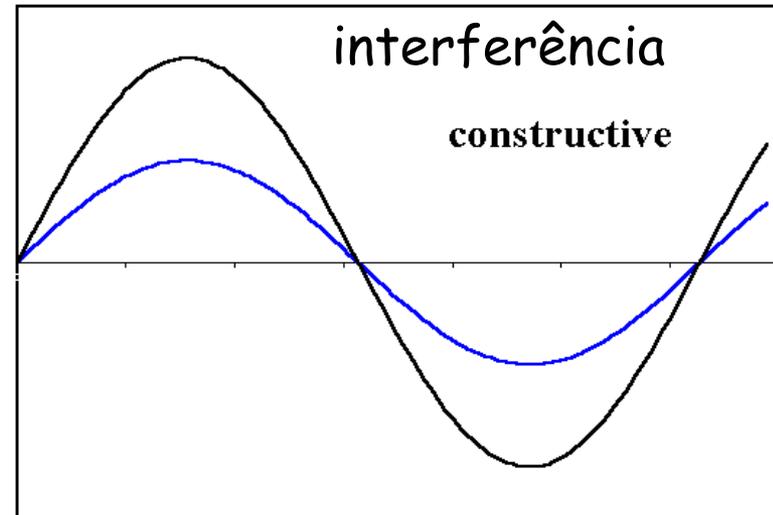
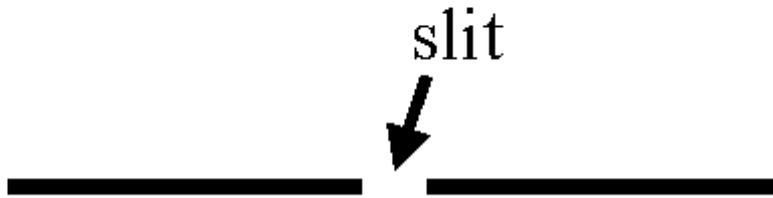
A matéria se comporta como **onda** !

Mas qual a diferença da matéria ser onda?

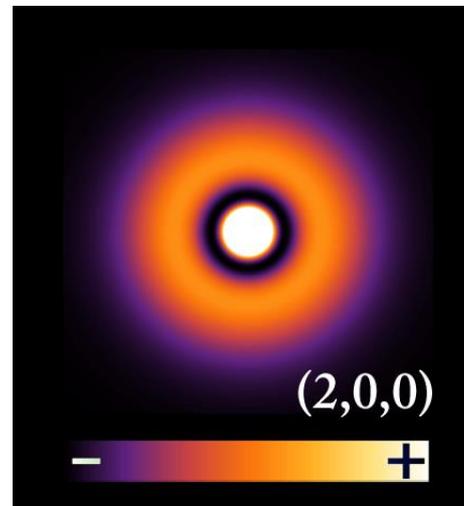
Alias, o que ondas fazem em particular?

<http://ircamera.as.arizona.edu/NatSci102/NatSci102/lectures/light.htm>

difração



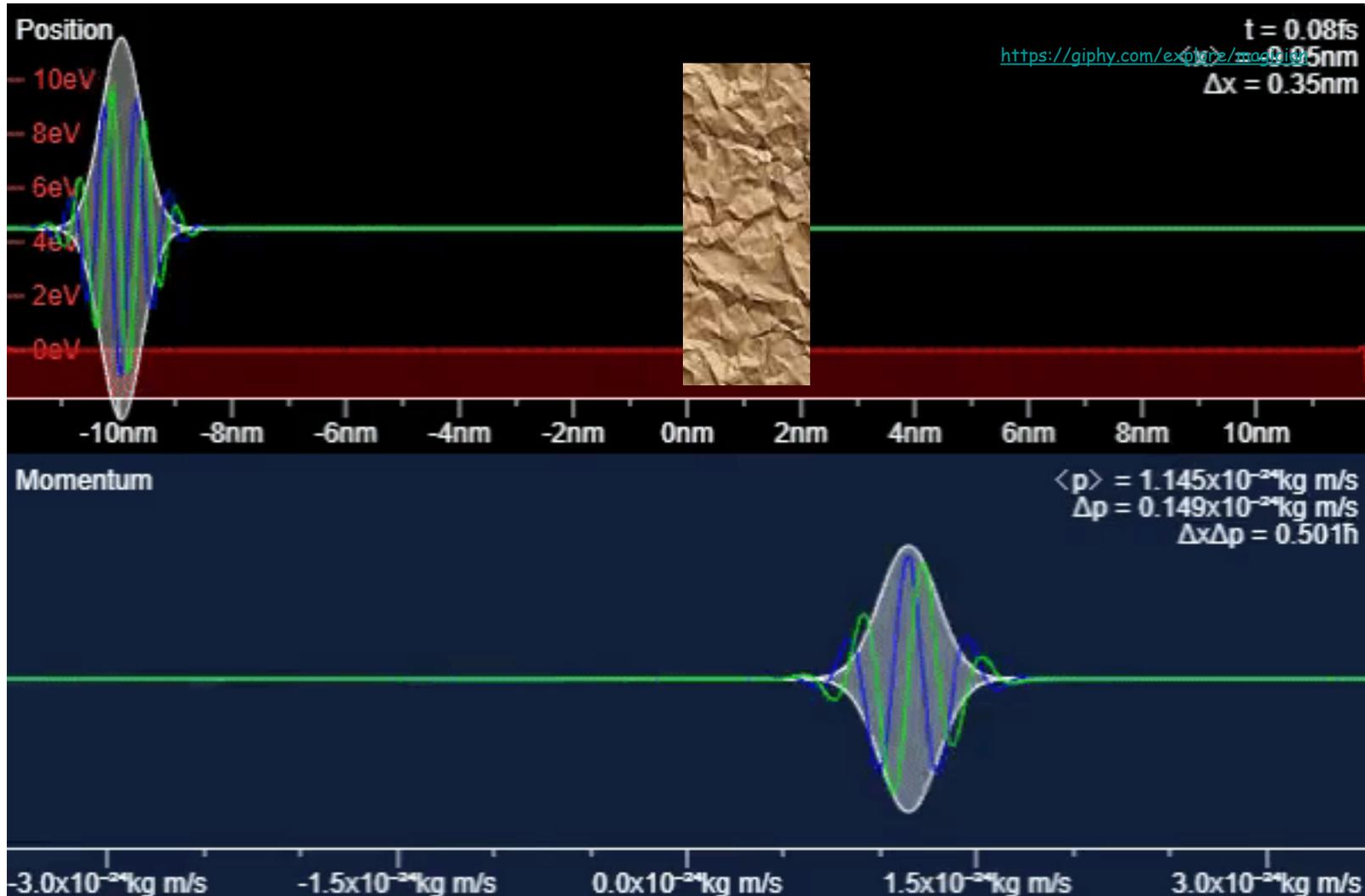
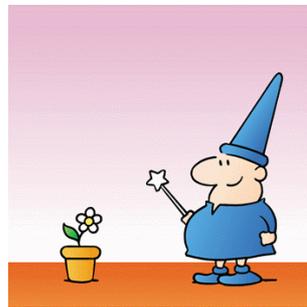
Ondas estacionárias



A "forma" do átomo

(em ultima análise esta forma explica toda química!)

Efeitos "mágicos"

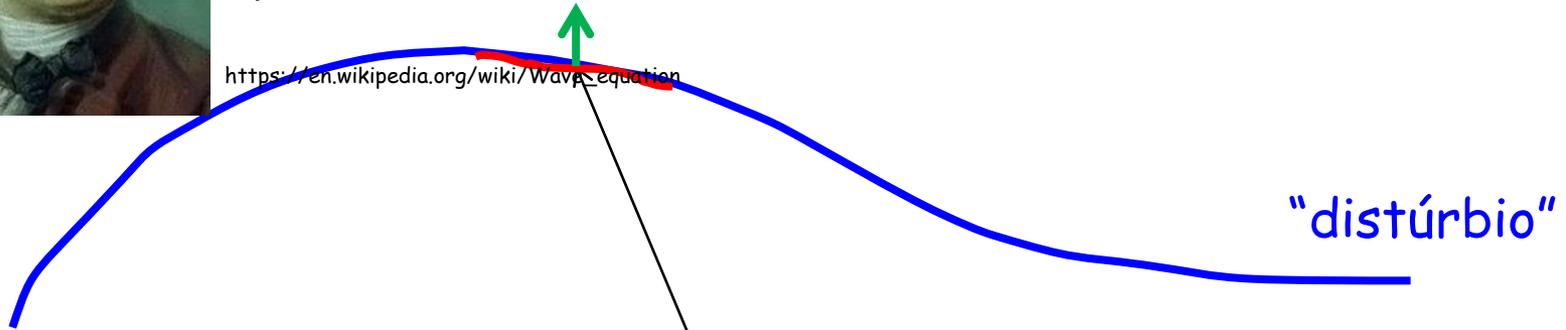


Alem disso, toda vez que existem ondas, existe uma Equações de onda



French scientist Jean-Baptiste le Rond d'Alembert (b. 1717) discovered the **wave equation** in one space dimension.

https://en.wikipedia.org/wiki/Wave_equation



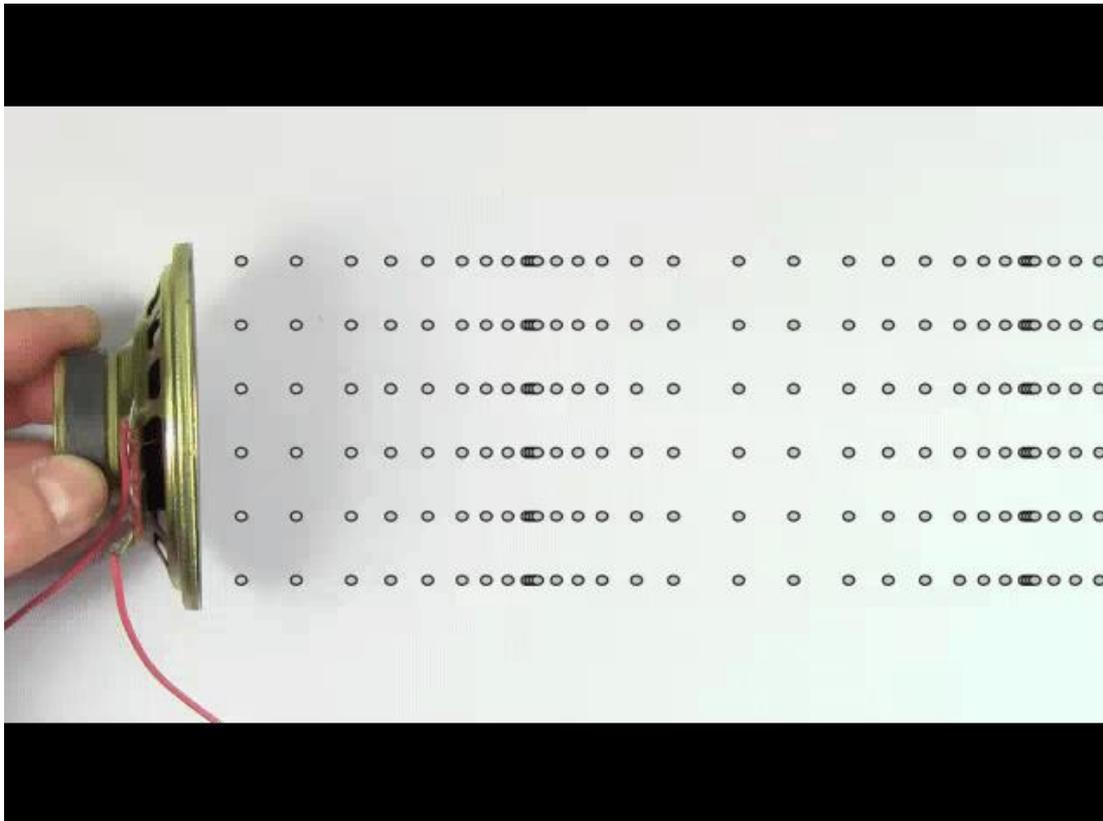
É proporcional a variação da variação do distúrbio com relação a posição

Aceleração do distúrbio numa dada posição (ex. onda transversal)

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} - \gamma^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = 0$$

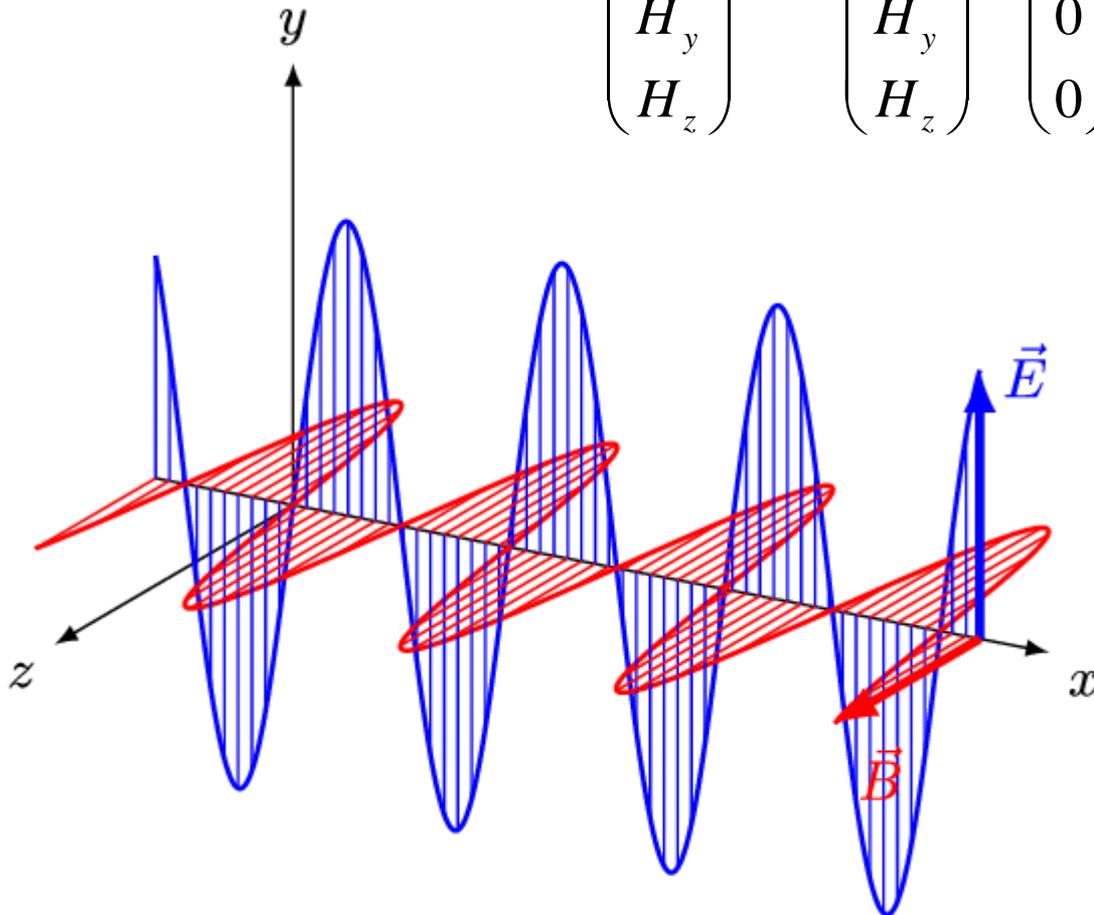
Ondas acústica: distúrbio na densidade do ar

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = 0$$



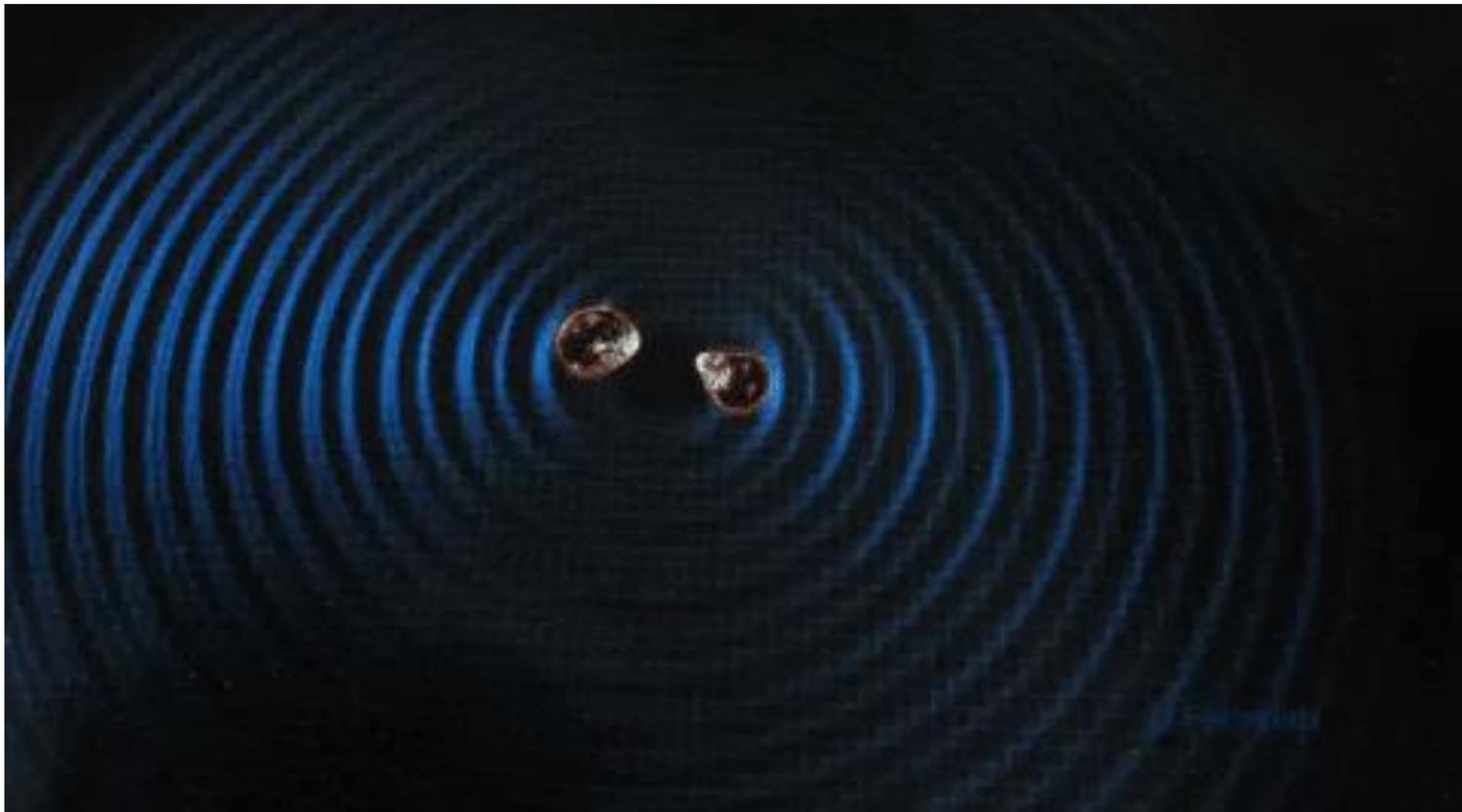
Onda eletromagnética no vácuo: distúrbio no campo eletromagnético

$$\nabla^2 \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \\ H_x \\ H_y \\ H_z \end{pmatrix} + k^2 \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \\ H_x \\ H_y \\ H_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$



Ondas gravitacionais: Distúrbio do espaço tempo

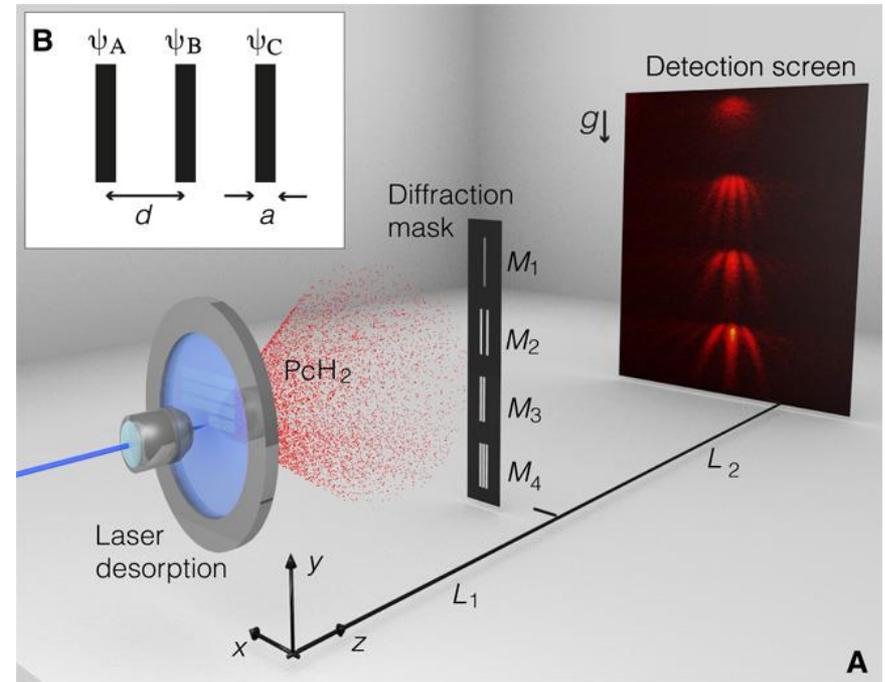
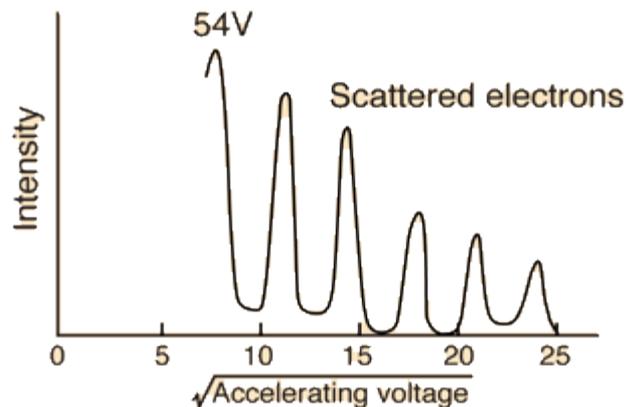
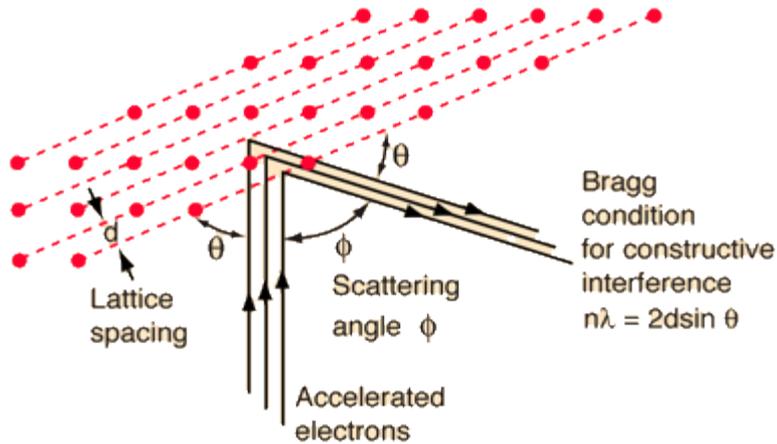
$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) h^{\mu\nu} = \square h^{\mu\nu} = 0$$



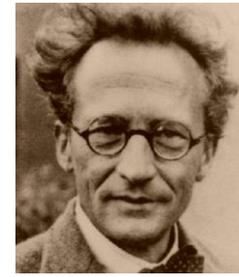
E finalmente, a equação de onda pra matéria

experimento de Davisson-Germer (1927)

"In search of multipath interference using large molecules"
Science Advances 11 Aug 2017



Equação de Schroedinger em 1D



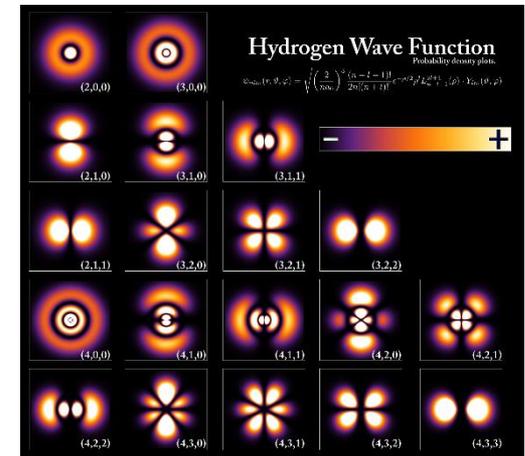
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}$$

exemplo 

Equação de Schroedinger independente do tempo em 1D

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V \right) u(x) = Eu(x)$$

exemplo



De forma sintética $\hat{H}\psi = E\psi$

V

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V \right) u(x) = E u(x)$$

Potencial Atômico

Explica toda tabela periódica
lasers He-Ne, etc

Potencial molecular

Explica toda Química

Potencial Atômico periódico

Explica a eletrônica moderna e a física de materiais

Poço quântico

Explica dispositivos Optoeletrônicos modernos: LASERS, DOTS, etc

Oscilador harmônico

Explica vibração em átomos e Moléculas (conectado com T)
É a mecânica quântica do campo eletromagnético

V

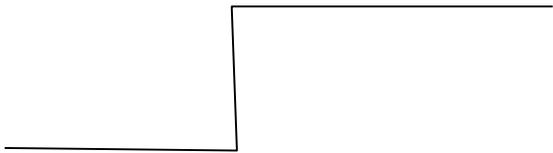
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V \right) u(x) = Eu(x)$$

Elétron livre



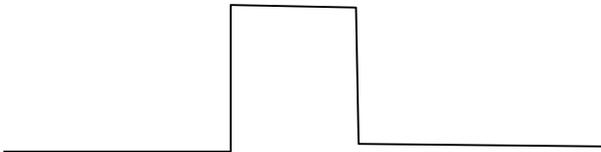
Transporte e solução
"mais" simples e trivial

Potencial barreira



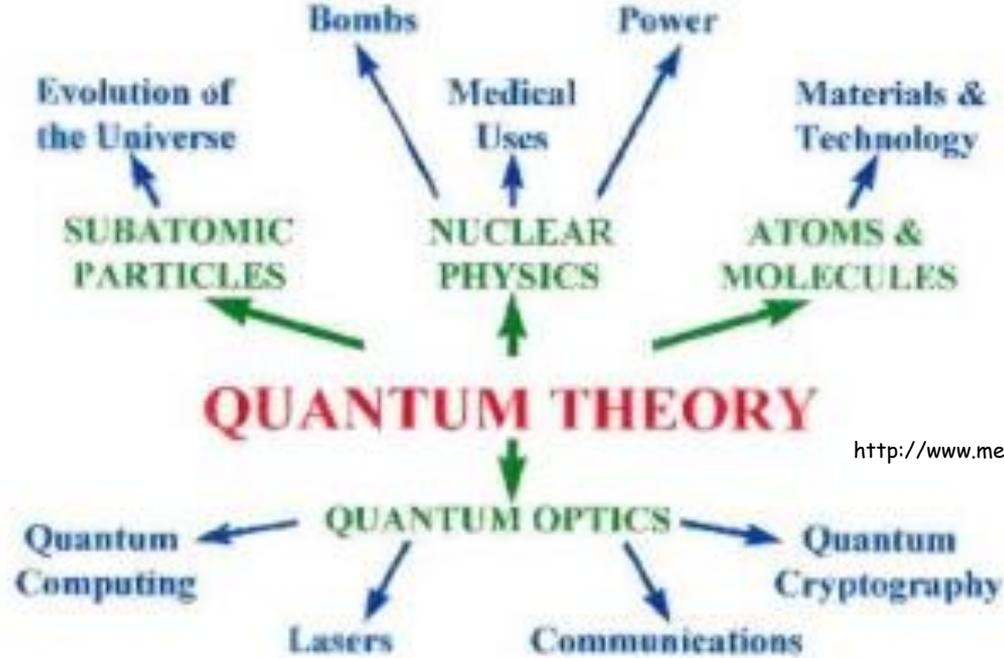
Efeitos de superfície
e espalhamento

Potencial de barreira não
infinita



Diodo tunnel, e muitas outras
aplicações

Calcula-se que 1/3 da economia americana é proveniente de aplicações resultantes da **mecânica quântica**



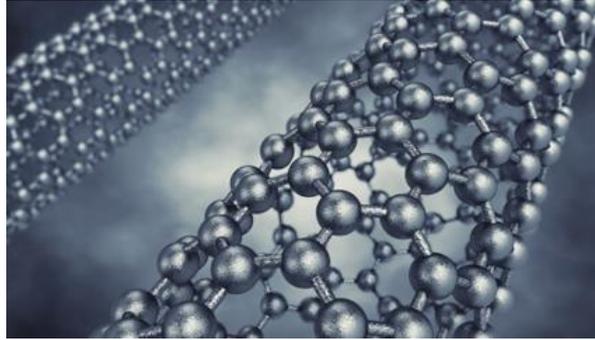
<http://www.metaphysics-for-life.com/quantum-theory.html>

Em particular, é a base da indústria eletrônica: a maior indústria do mundo



Tecnologias fundamentais no Futuro

Nanotecnologia



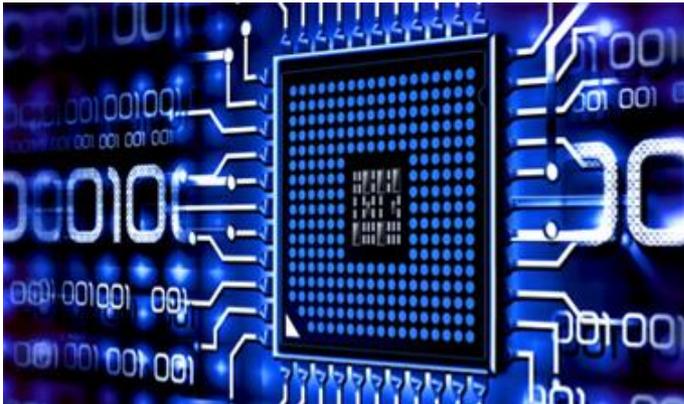
<http://www.hse.gov.uk/nanotechnology/>

Biotecnologia



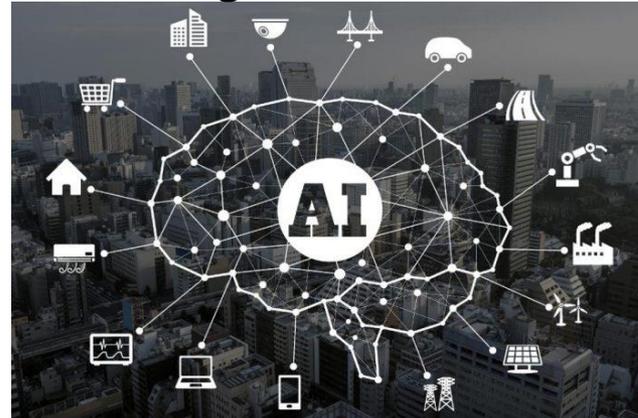
<https://agfundernews.com/what-is-agriculture-biotechnology.html>

Computação **Quântica**



<https://www.edx.org/course/computation-structures-3-computer-mitx-6-004-3x-0>

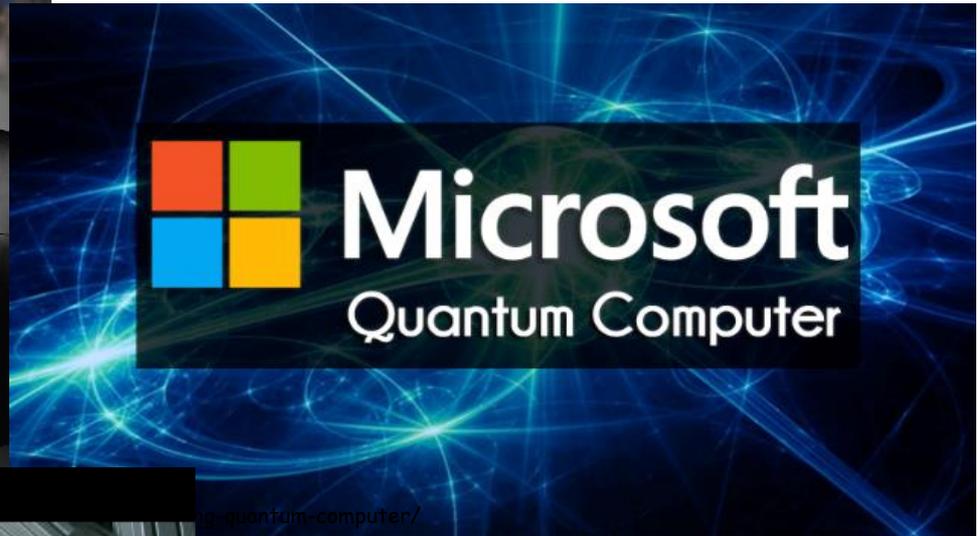
Inteligência Artificial



<https://www.techworm.net/2017/11/yotpo-use-51-million-funding-power-e-commerce-industry-artificial-intelligence.html>

Um exemplo atual: computação quântica

Já a muito tempo deixou de ser "especulação futurística".....

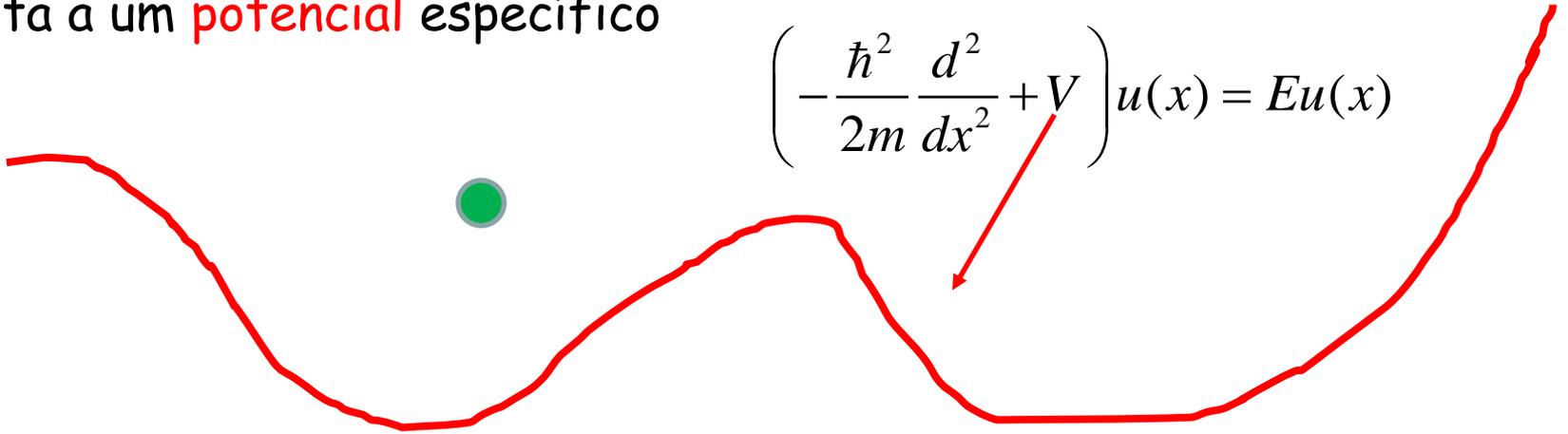


https://www.electronicproducts.com/Hardware/Computers/IBM_establishes_new_business_to_sell_50_qubit_quantum_computers.aspx

Ok mas na verdade o problema e muito mais complexo!

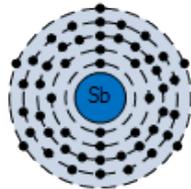
A mecânica quântica formulada ate agora serve apenas para 1 **partícula** sujeita a um **potencial** específico

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V \right) u(x) = Eu(x)$$

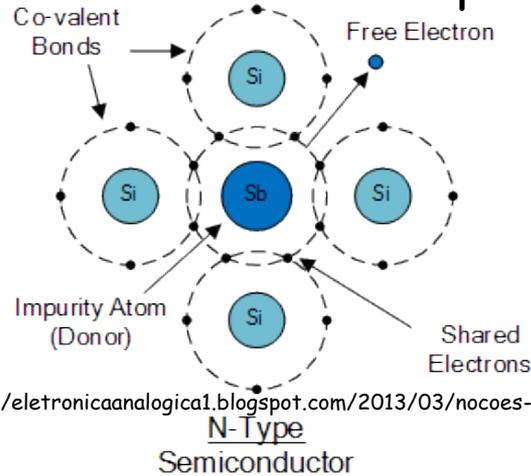


Mas o problema real e um problema de muitos corpos em mecânica quântica

An Antimony Atom,
Atomic number = "51"



Antimony atom showing
5 electrons in its outer
valence shell (o)



<http://eletronicaanalogica1.blogspot.com/2013/03/noco-es-basicas-de-semicondutores.html>

Precisamos pensar nesta teoria para sistemas mais complexos....

Questão simples e direta: Por que os materiais são como são?



brilho



cor



dureza



transparência



opacidade



flexibilidade

Voltando no tempo: 1890-1900



Explosão de artigos sobre propriedades de materiais:

- ¥ Viscosidade
- ¥ Elasticidade
- ¥ Condutividade térmica
- ¥ Condutividade elétrica
- ¥ Coeficiente de expansão
- ¥ índice de refração
- ¥ Coeficientes termoelásticos
- ¥ etc.

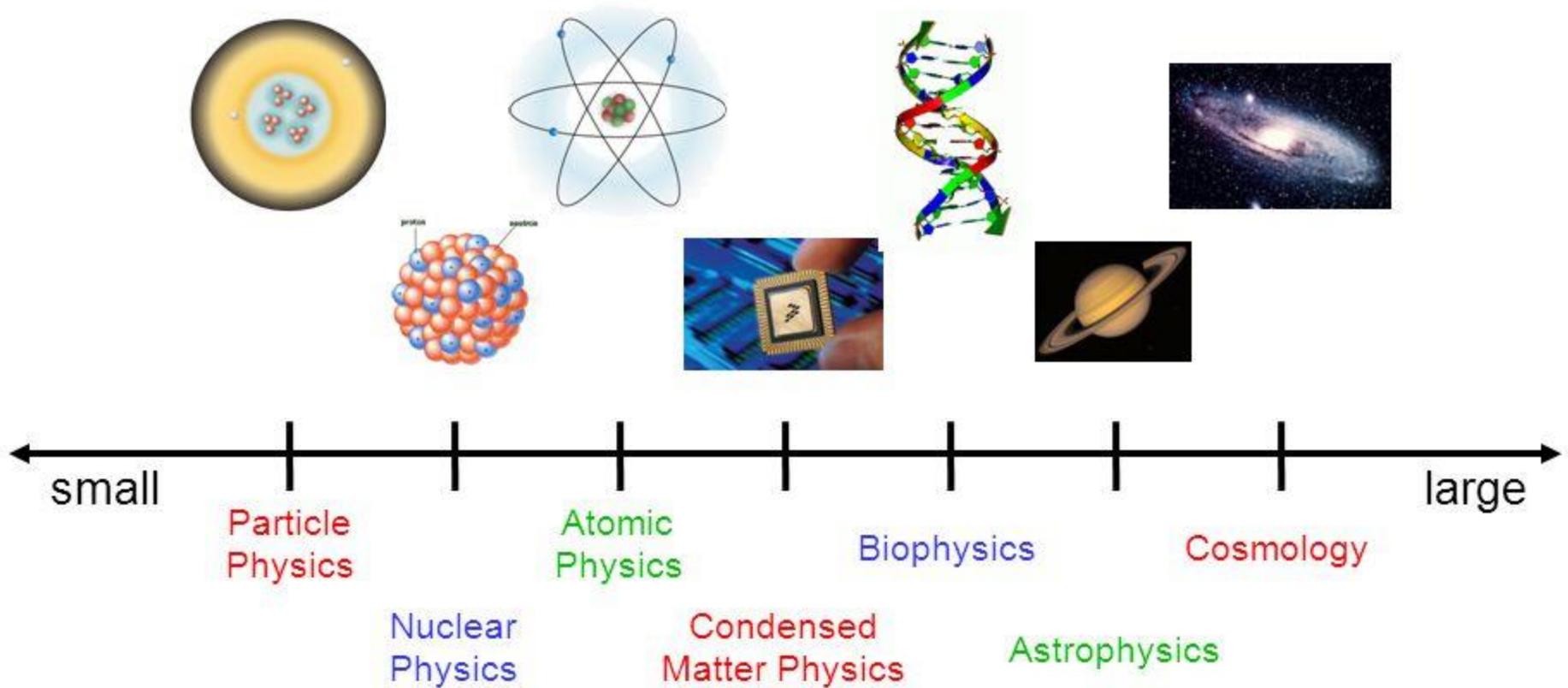
<http://suitpossum.blogspot.com.br/2014/12/academic-bitcoin-research.html>

No entanto, tudo é empírico !

Não existia teoria quantitativa para descrever a matéria, antes do surgimento da mecânica quântica!

Mas precisamos ir além, e fundou-se um novo ramo da física pra resolver este problema (usará teoria quântica claro!)

Vamos olhas pra um ramo da física que trata deste problema: Física da matéria condensada



<http://slideplayer.com/slide/5004180/>



(termodinâmica+ Mecânica Quântica aplicada a matéria)

Vamos tentar definir mais precisamente o que é a física da **matéria condensada**:

(i) O campo da física que lida com as propriedades físicas da **matéria** macroscópica e microscópica.

(mas não tão condensadas como uma estrela de neutron)

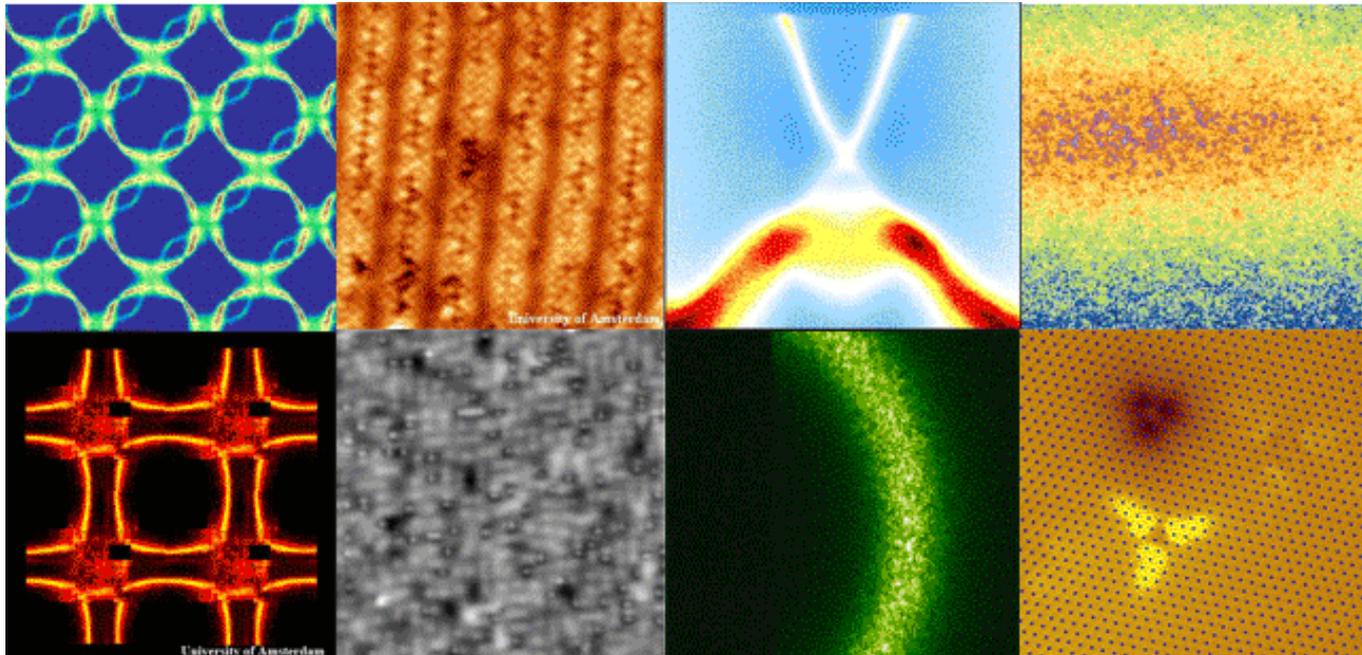
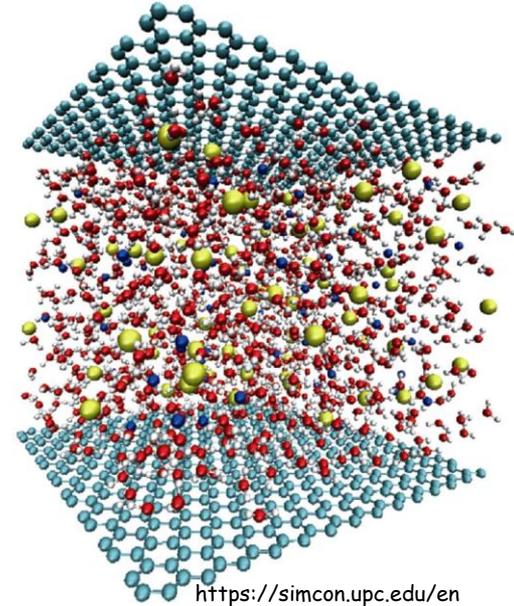
(ii) Em particular esta interessada com as fases "**condensadas**" que aparecem com um número de constituintes **extremamente alto** e com interação forte entre estes entes.

(iii) Os exemplos mais simples de fases condensadas são **sólidos e líquidos**, que emergem das forças electromagnéticas entre átomos e moléculas.

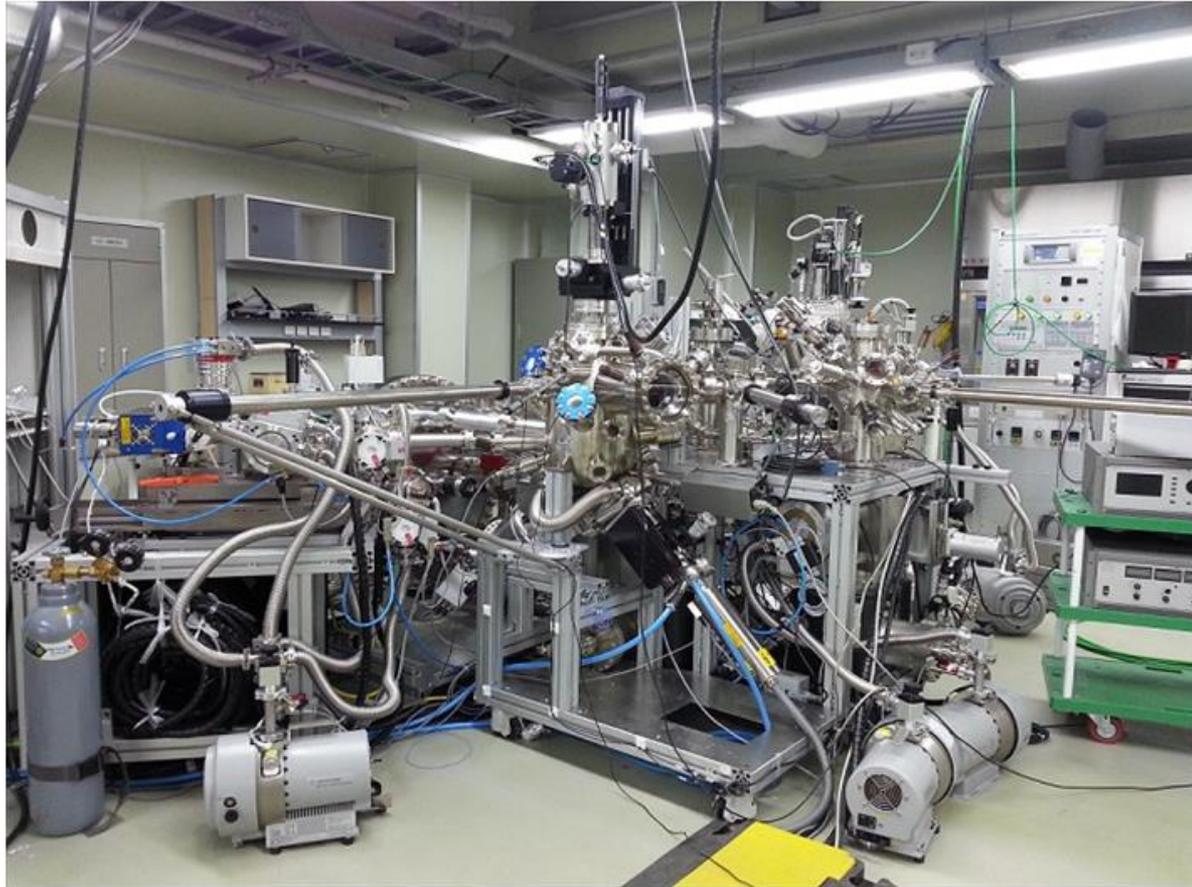
(a interação é conhecida)

(i) Muitas sub-áreas (átomos frios, biofísica, matéria "soft", **Física do estado sólido**, etc

Resumindo: é a física que ocorre quando temos muitos átomos interagindo: física do estado sólido ou física da matéria condensada



Hoje em dia é aproximadamente 1/3 de toda pesquisa em física



ARPES system

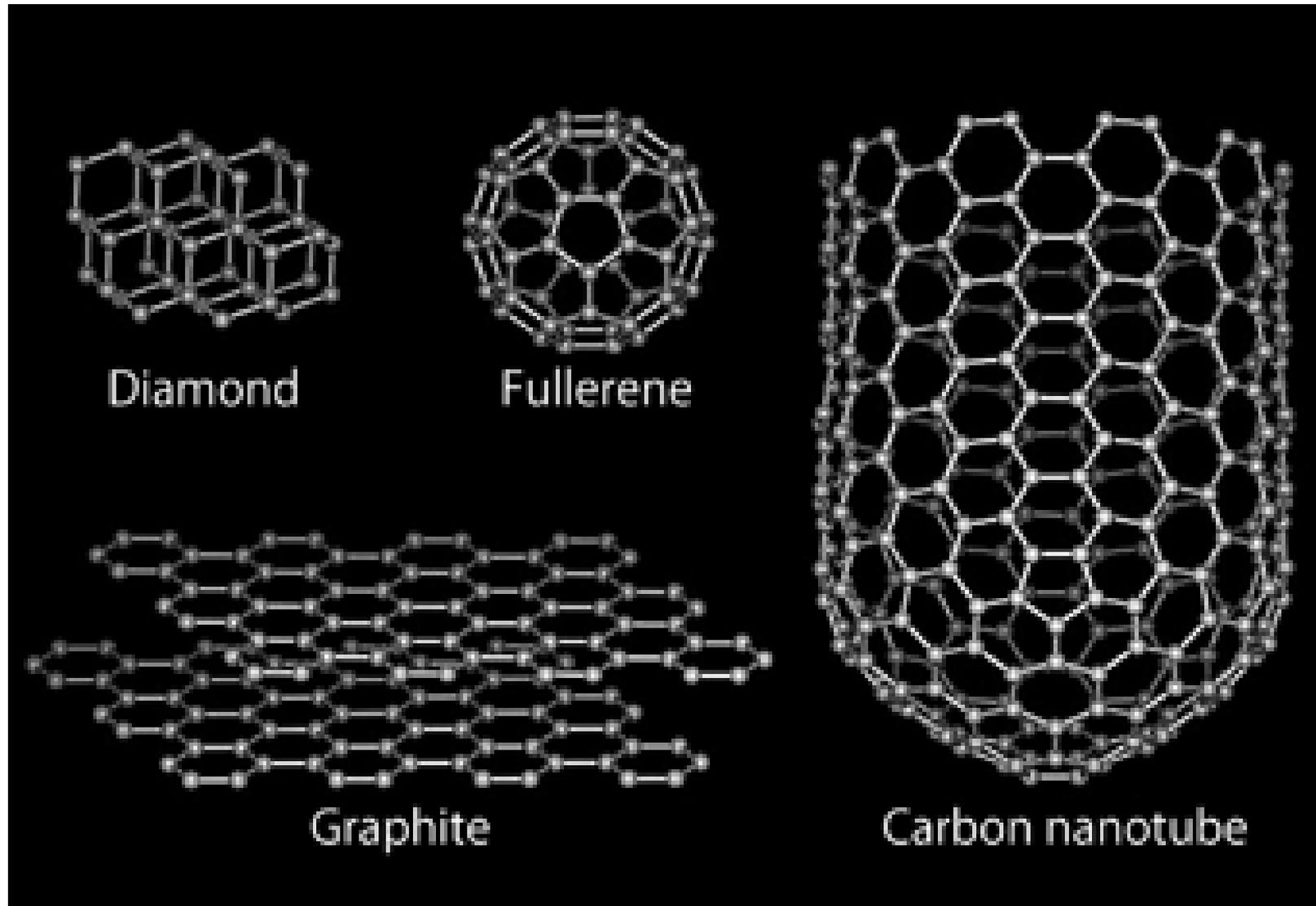
<http://ares.snu.ac.kr/Equipment.html>

Ok, por que isso acontece? Por que ela é tão interessante?

1) É o mundo a sua volta



É simplesmente a teoria que explica a física de materiais



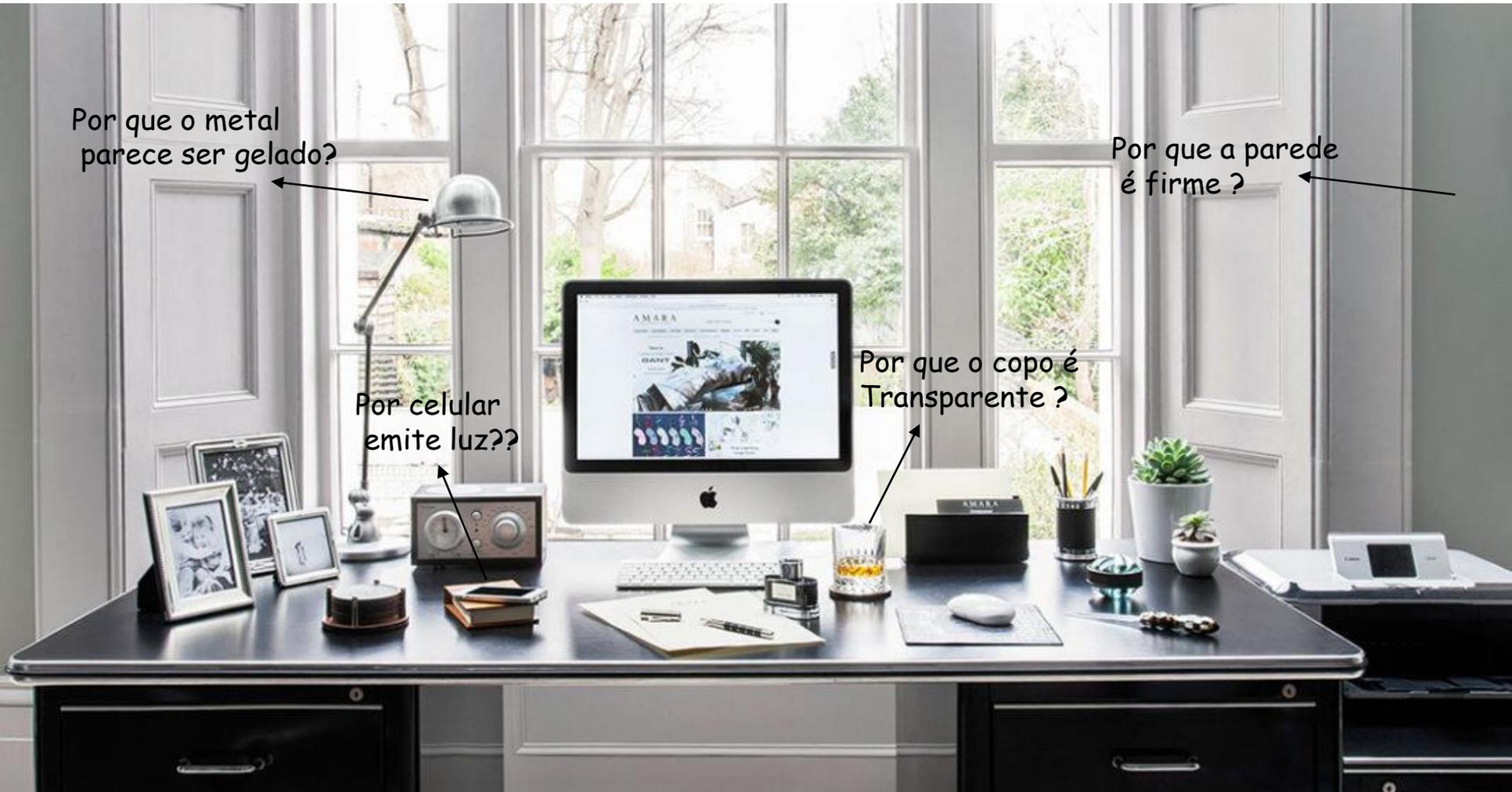
Explica o comportamento dos materiais a nossa volta....

Por que o metal parece ser gelado?

Por que a parede é firme?

Por que o celular emite luz??

Por que o copo é transparente?



É mundana!

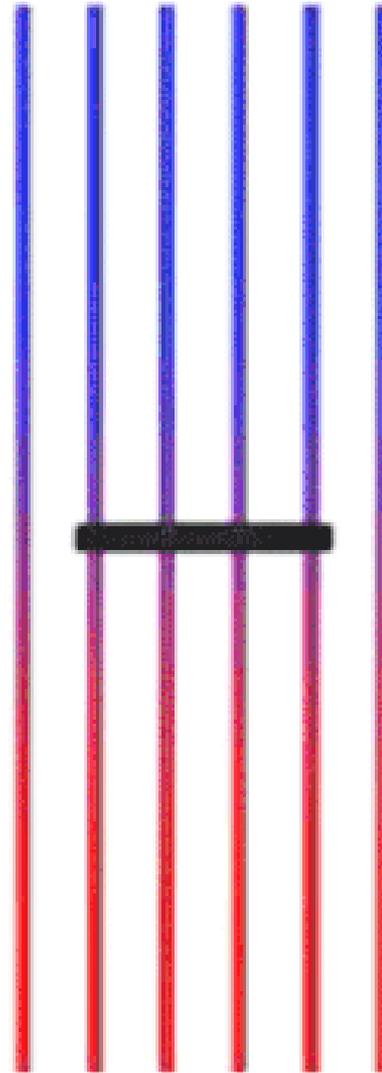
3) É fantástica (exemplo: supercondutividade)



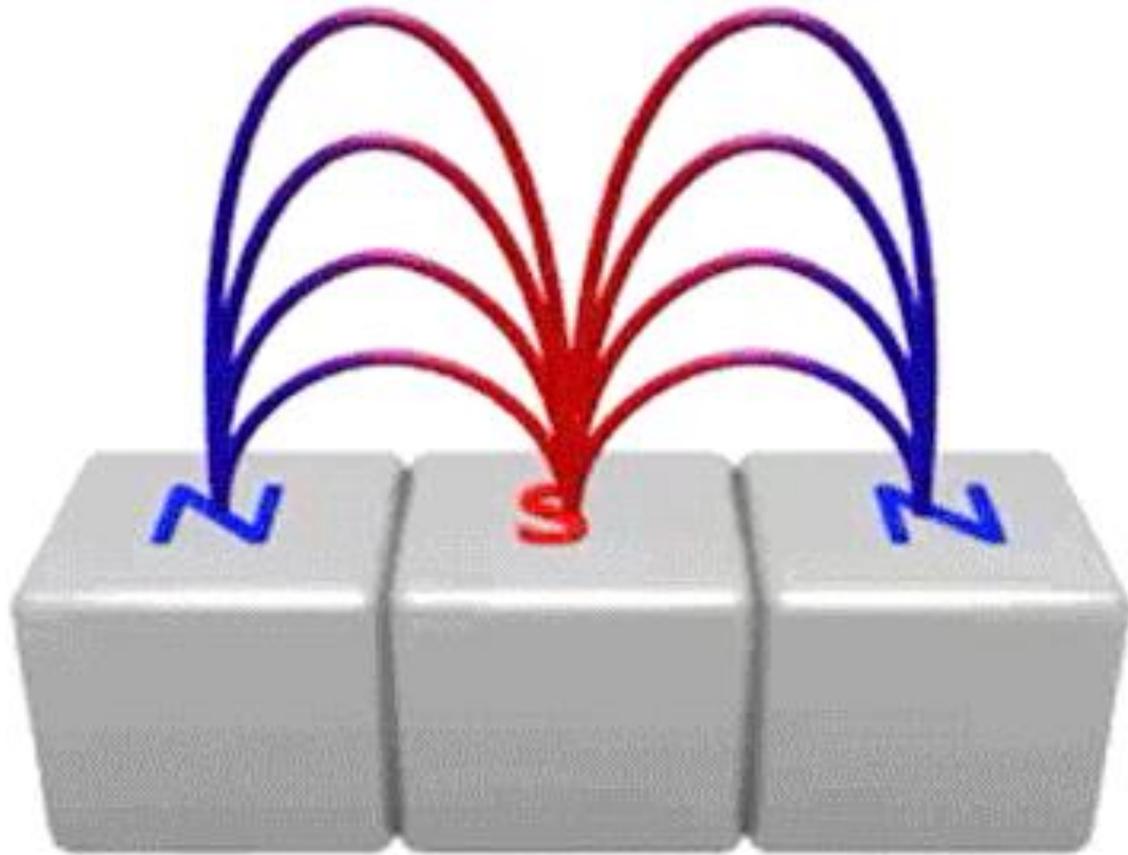
..... 23° C

.... -166° C

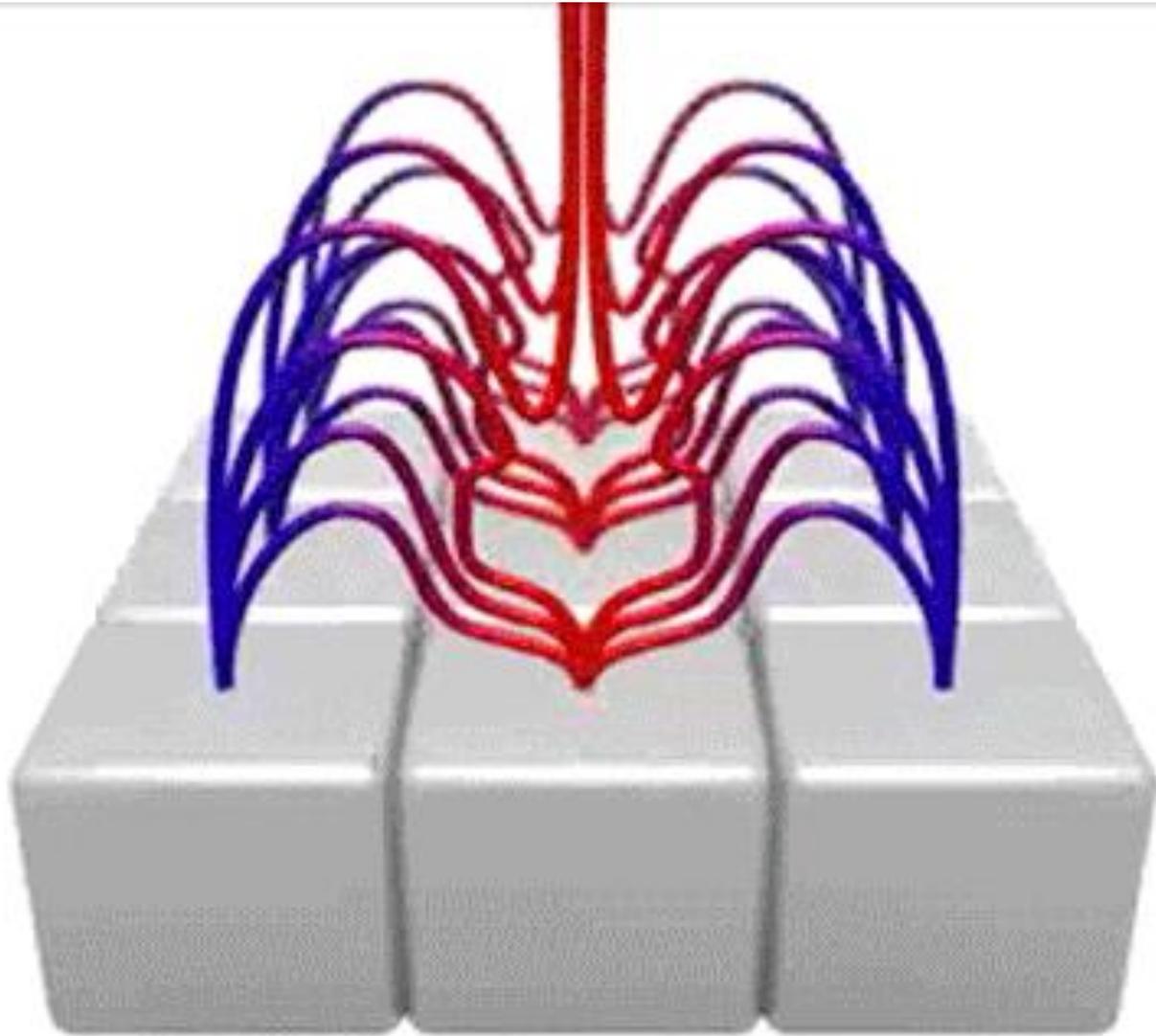
when the temperature reaches -166°C, magnetic fields can no longer penetrate the superconductor



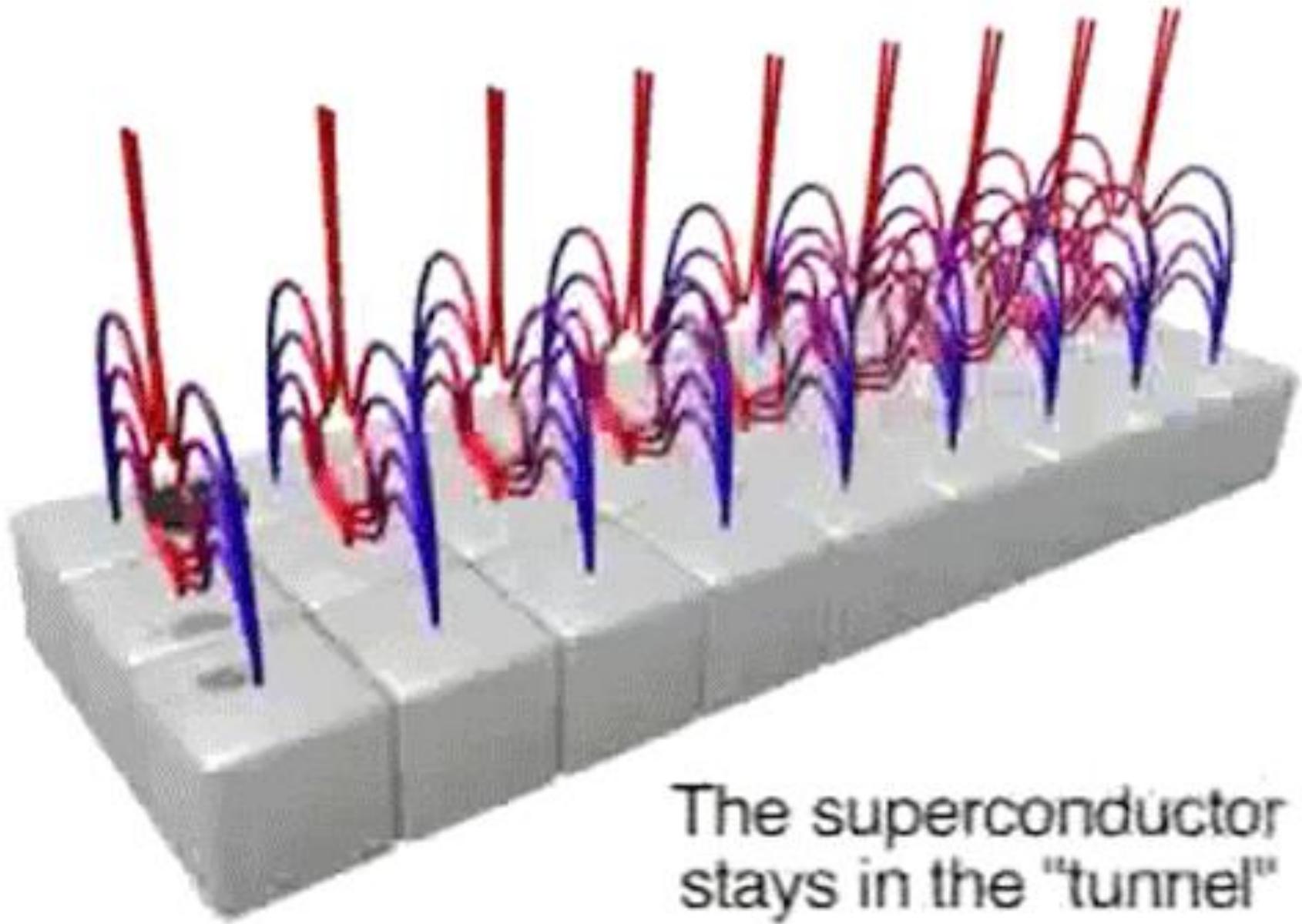
magnetic field lines



three magnets together make fields like this



add more magnets to make the track



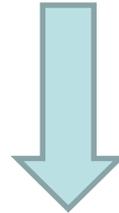
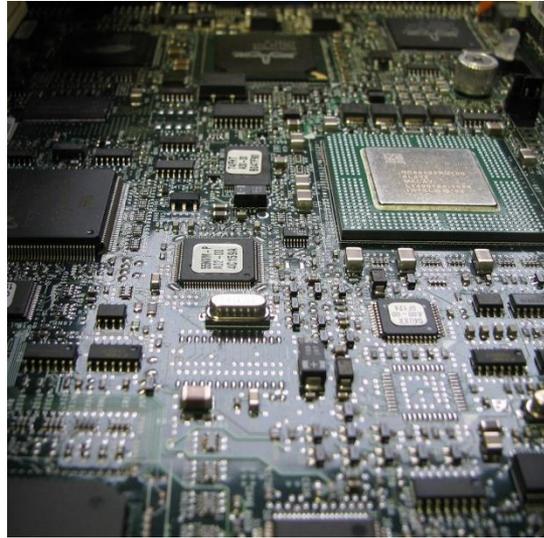
The superconductor
stays in the "tunnel"



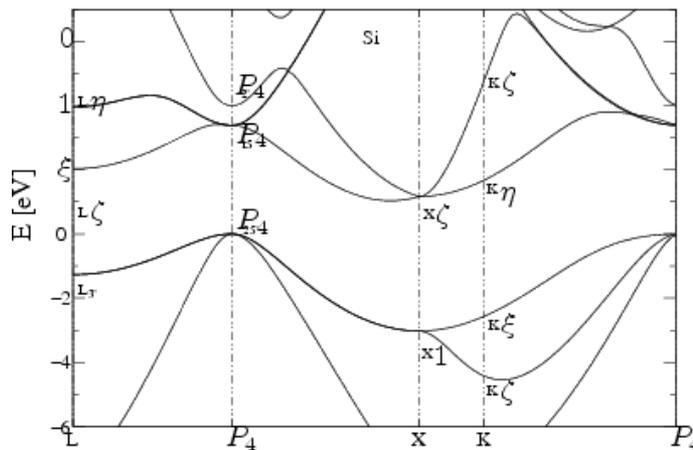


3) É útil

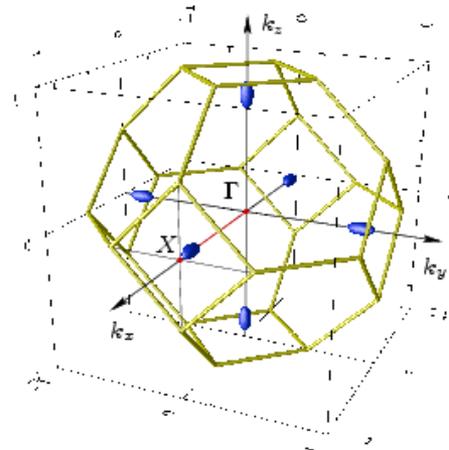
Resumindo, a revolução do Silício da segunda metade do século 20



Só foi possível graças as estruturas de bandas (resolução da equação de Schroedinger num sólido)



(a) Band diagram of silicon.



(b) First conduction band valleys.

Poxa, se a matéria condensada é tão útil, deve ser tão não profunda, rasa intelectualmente.... Não !!!



- 4) É profunda :
(i) Inspiração para outras áreas da física
(o Teoria do Boson de Higgs tem origem em física de supercondutores..)

Evading the Goldstone Theorem

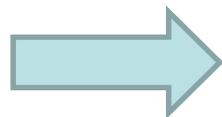
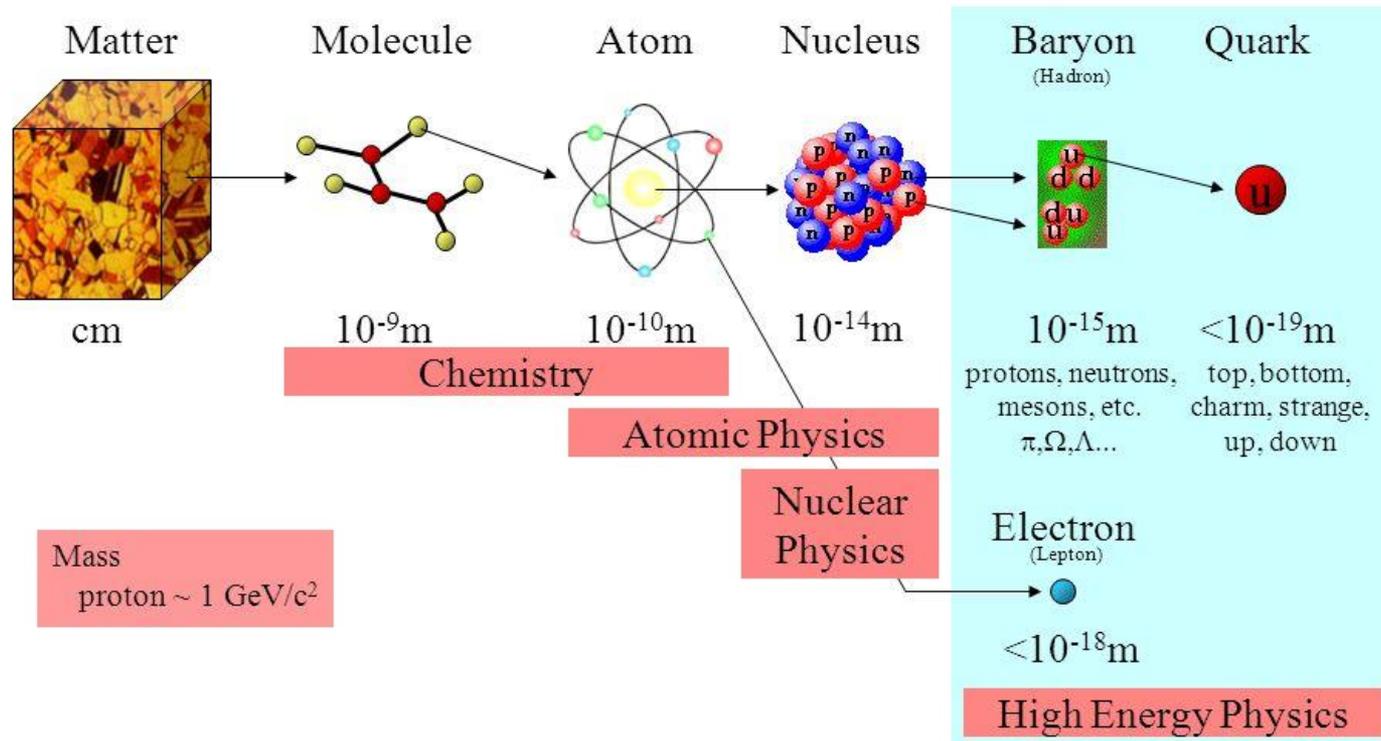
Nobel Lecture, 8 December 2013

by Peter Higgs

University of Edinburgh, Edinburgh, United Kingdom.

Then in 1961, I read Nambu's and Goldstone's papers on models of symmetry breaking in particle physics based on an analogy with the theory of superconductivity. (Nambu's models were inspired by the Bardeen, Cooper & Schrieffer theory, based on Bose condensation of Cooper pairs of electrons: Goldstone used scalar fields, with a 'wine bottle' potential to induce Bose condensation, as in the earlier Ginzburg-Landau theory.) What I found very attractive was the

5) É anti-reducionista



Não iremos entender as propriedades da matéria por este caminho:

Lema da física da matéria condensada

MORE is

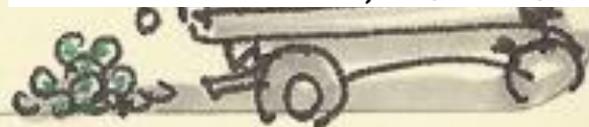
DIFFERENT

P.W. ANDERSON



Philip Warren Anderson
1977
for the theoretical investigations of the electronic structure of magnetic and disordered systems
U.S.A.

“constructionist” one: The ability to reduce everything to simple fundamental laws does not imply the ability to start from those laws and reconstruct the universe. In fact, the more the ele-



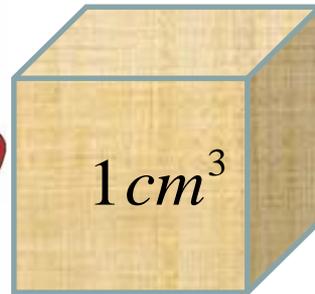
Ok, então como como estudar as propriedades dos sólidos?

Começamos bem...

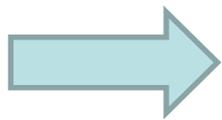


- (i) sabemos as partículas envolvidas (núcleos, elétrons, Fótons)
- (i) sabemos a interação (eletromagnética)
- (ii) Sabemos a teoria: mecânica quântica

Mas a vida não é fácil....



10^{23} partículas



Resolver este problema permite não apenas enormes avanços da física da matéria condensada, mas também tem reflexo em outras áreas da física



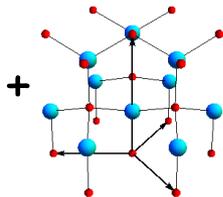
propriedades emergentes podem aparecer que englobam um material macroscópico e muitas vezes são bastante diferentes da soma de suas partes.

Tabela Periódica

"Geometria" particular

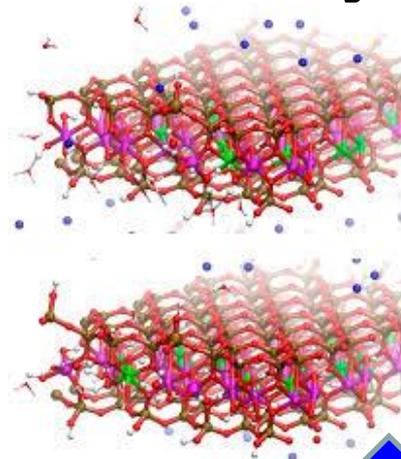
Física da matéria condensada

PERIODIC TABLE OF THE ELEMENTS

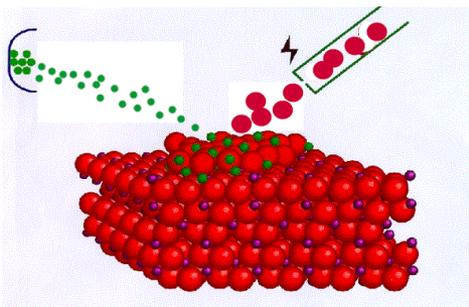


= infinitas possibilidades!
 (renovação da eletrônica, aviões mais leves e foretes, energia solar, etc., etc., etc.)

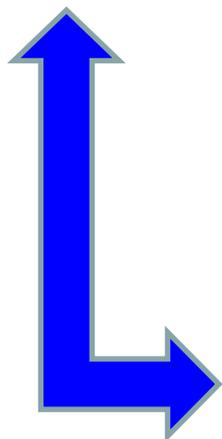
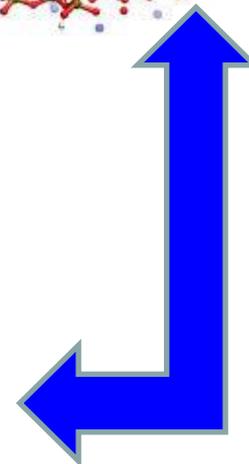
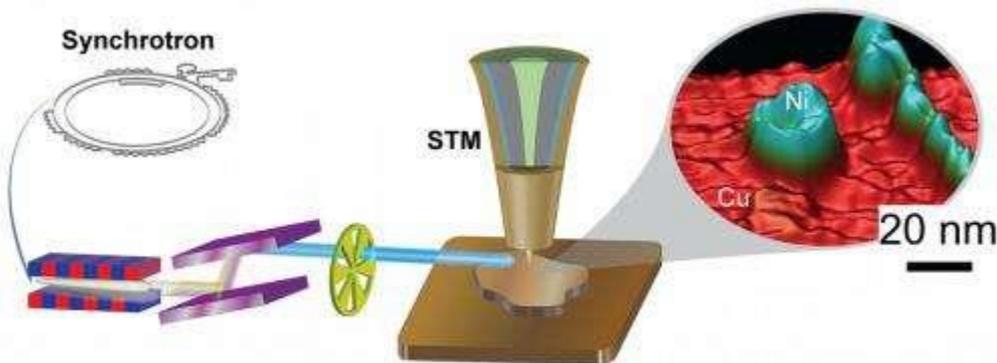
TEORIA-SIMULAÇÃO



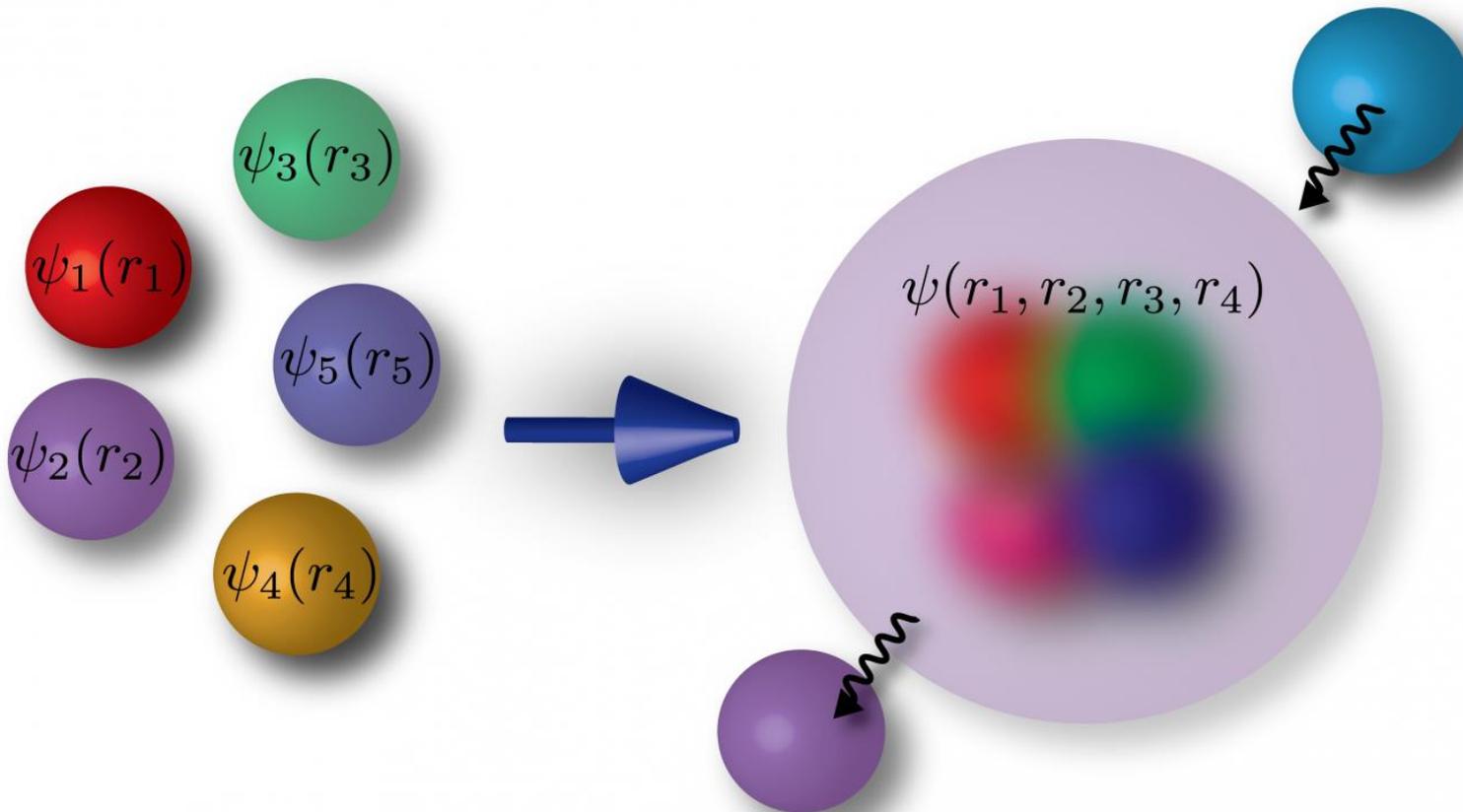
SÍNTESE



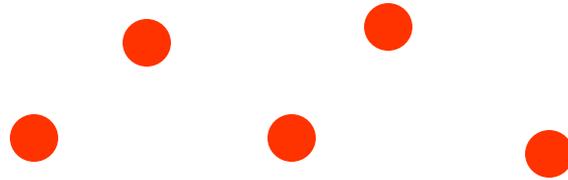
CARACTERIZAÇÃO



Tudo muito lindo, mas como formular uma mecânica quântica para muitos corpos interagentes?



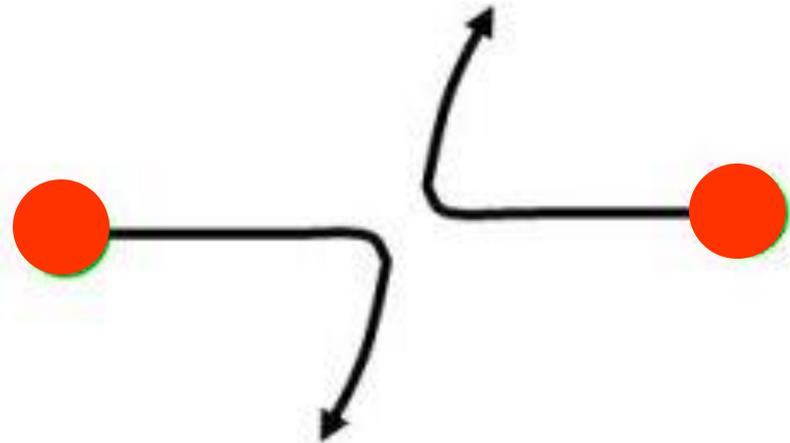
Em mecânica quântica, partículas idênticas são indistinguíveis.....



Numa colisão de duas partículas iguais é impossível distinguir



Entre esta situação



E esta outra!

Logo, em Mecânica Quântica convencional o problema de muitas partículas idênticas interagentes não pode ser "separado",
(mas num sólido. N vale)

$$\hat{H}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$$

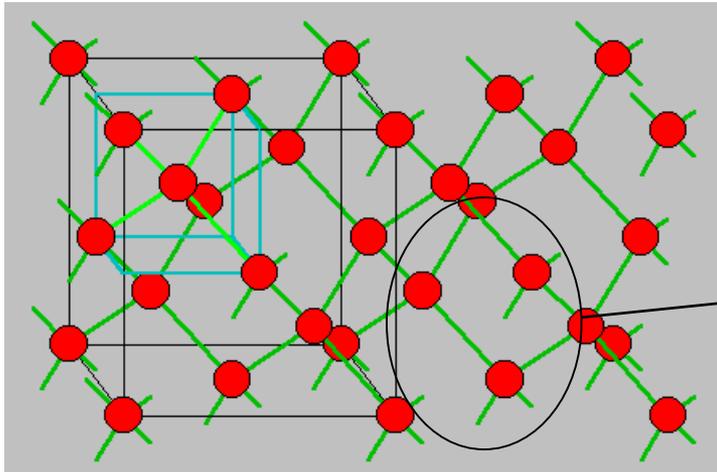
Problemas : 1. extremamente difícil de calcular ψ



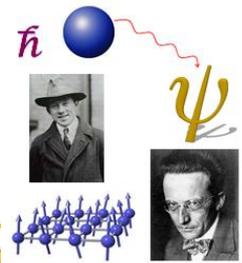
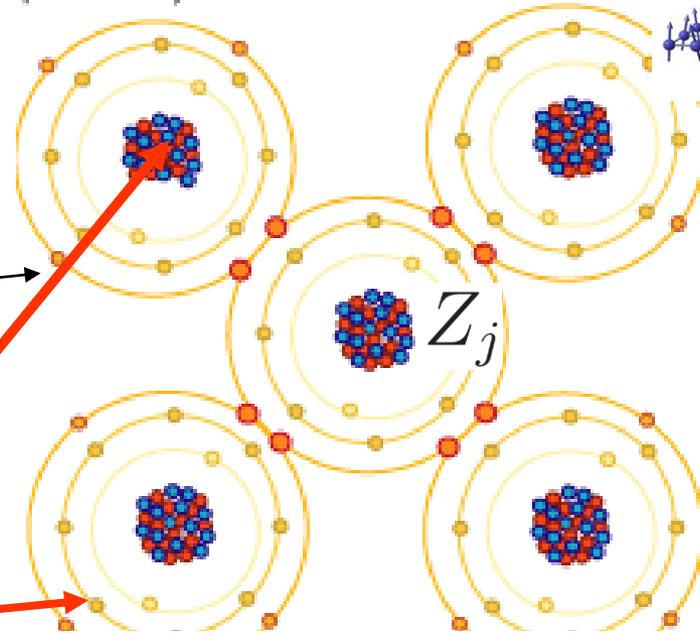
2. extremamente difícil de interpretar ψ !

Imagine o caso de um sólido (nosso objetivo no curso!)

Cristal de Si



Formation of a pure silicon crystal



$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^M \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{R}_i}^2 - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\vec{r}_i}^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^M \sum_{j>i}^M \frac{Z_i Z_j}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \frac{Z_j e}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

Origem \vec{r}_i

Energia Cinética dos núcleos

Energia Cinética dos elétrons

Interação Coulombiana núcleo-núcleo

Interação Coulombiana núcleo-elétron

Interação Coulombiana elétron-elétron

O Hamiltoniano é tão longo que pode até servir de inspiração pra quem quer fazer uma tatuagem bem grande e ainda não tem uma ideia definida.....

$$\begin{aligned}
 H &= -\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 - \sum_a \frac{1}{2m_a} \nabla_a^2 - \sum_i \sum_a \frac{Z_a}{|r_i - r_a|} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{1}{|r_i - r_j|} + \frac{1}{2} \sum_a \sum_{\beta \neq a} \frac{Z_a Z_\beta}{|r_a - r_\beta|} \\
 \left[-\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 - \sum_i \sum_a \frac{Z_a}{|r_i - r_a|} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{1}{|r_i - r_j|} \right] \Psi(\{r_i\}; \{r_a\}) &= \mathcal{E}_e(\{r_a\}) \Psi(\{r_i\}; \{r_a\}) \\
 \left[-\sum_\beta \frac{1}{2m_\beta} \nabla_\beta^2 + \mathcal{E}_e(\{r_a\}) + \frac{1}{2} \sum_\beta \sum_{\gamma \neq \beta} \frac{Z_\beta Z_\gamma}{|r_\beta - r_\gamma|} \right] \Phi(\{r_a\}) &= \mathcal{E} \Phi(\{r_a\}).
 \end{aligned}$$

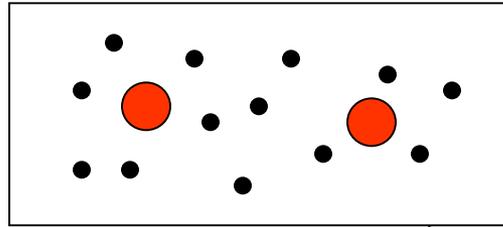
Quem poderá nos salvar?



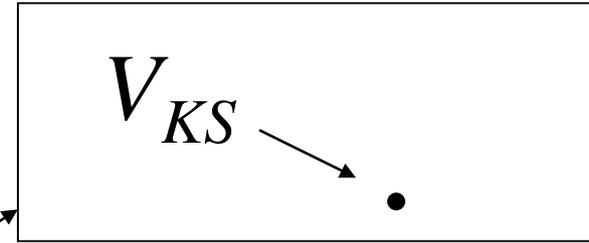
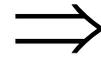
Teoria do Funcional da Densidade Walter Kohn-1964



$$E[n(\vec{r})]$$



Sistema Real



Sistema Fictício de elétrons
não interagentes sujeitos a
um potencial médio

$$n(r)$$

⇒ Método é ainda exato !



Problema de muitos corpos é
reduzido a o problema de 1 corpo
sujeito a um potencial médio:
Equação de Kohn-Sham

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{KS}(\vec{r})\right]\psi_i(\vec{r}) = E_i\psi_i(\vec{r})$$

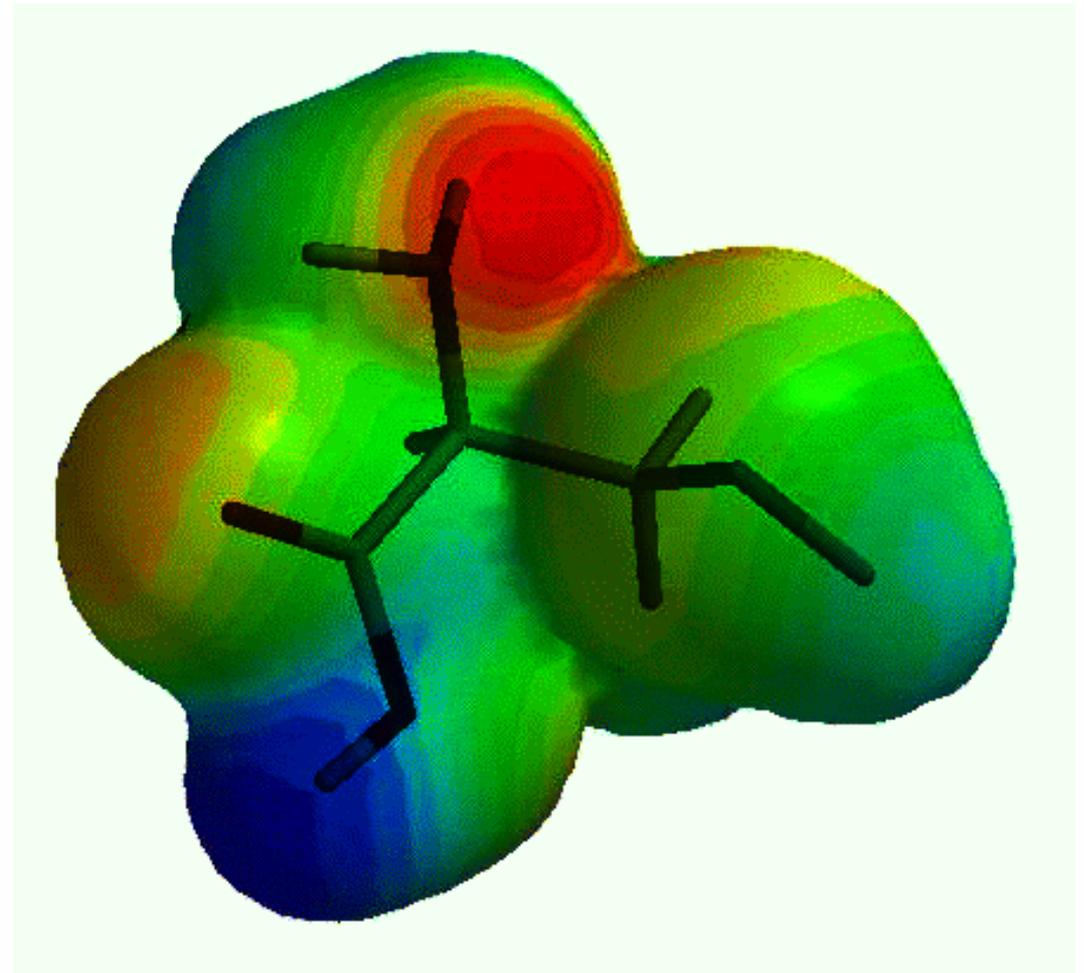


Complexidade do problema
é colocada neste potencial

The Nobel Prize in Chemistry 1998

Walter Kohn

"for his development of the density-functional theory"



Citation Statistics from 110 Years of *Physical Review*

June 2005 Physics Today 49

Publicly available data reveal long-term systematic features about citation statistics and how papers are referenced. The data also tell fascinating citation histories of individual articles.

Sidney Redner

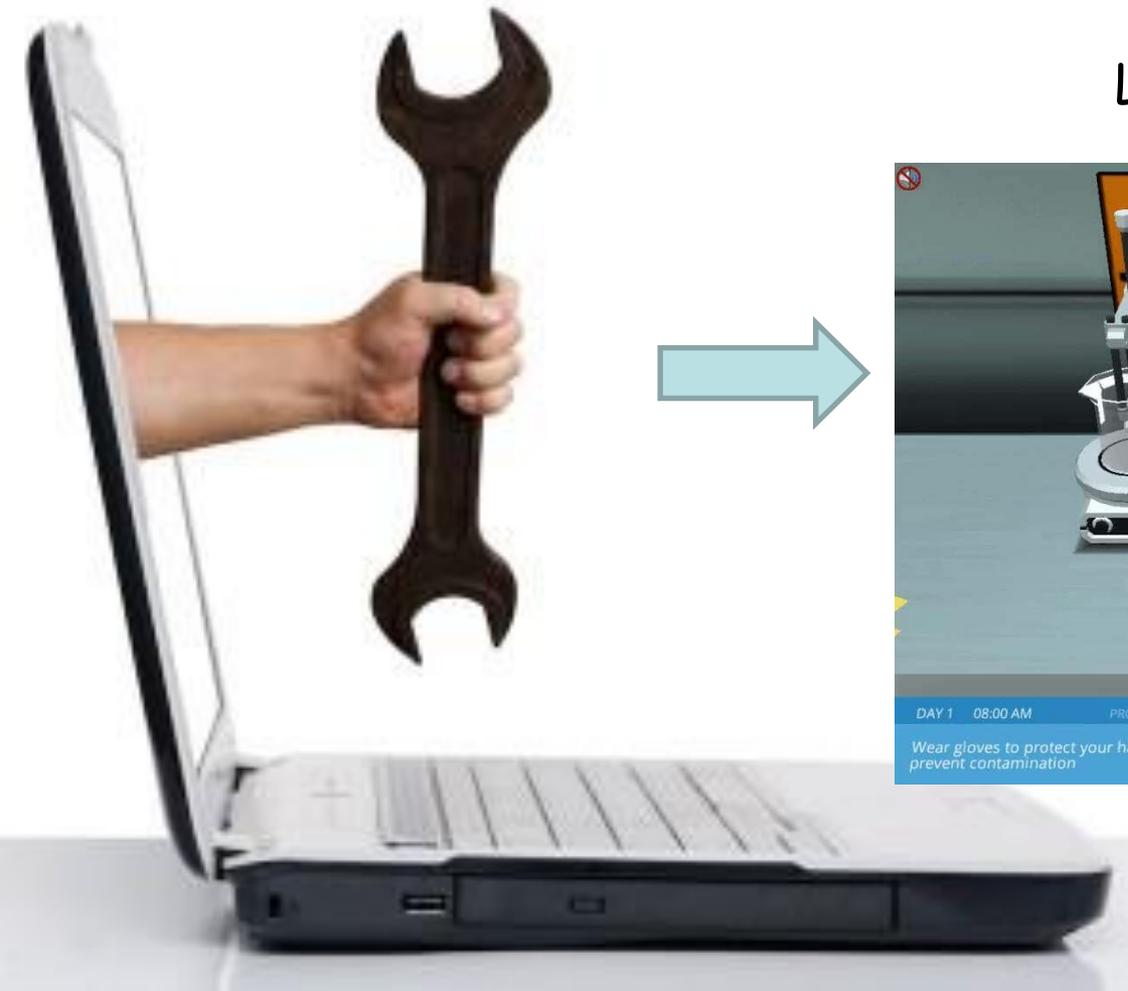


Table 1. *Physical Review* Articles with more than 1000 Citations Through June 2003

Publication	# cites	Av. age	Title	Author(s)
PR 140, A1133 (1965)	3227	26.7	Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects	W. Kohn, L. J. Sham
PR 136, B864 (1964)	2460	28.7	Inhomogeneous Electron Gas	P. Hohenberg, W. Kohn
PRB 23, 5048 (1981)	2079	14.4	Self-Interaction Correction to Density-Functional Approximations for Many-Electron Systems	J. P. Perdew, A. Zunger
PRL 45, 566 (1980)	1781	15.4	Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method	D. M. Ceperley, B. J. Alder
PR 108, 1175 (1957)	1364	20.2	Theory of Superconductivity	J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer
PRL 19, 1264 (1967)	1306	15.5	A Model of Leptons	S. Weinberg
PRB 12, 3060 (1975)	1259	18.4	Linear Methods in Band Theory	O. K. Anderson
PR 124, 1866 (1961)	1178	28.0	Effects of Configuration Interaction of Intensities and Phase Shifts	U. Fano
RMP 57, 287 (1985)	1055	9.2	Disordered Electronic Systems	P. A. Lee, T. V. Ramakrishnan
RMP 54, 437 (1982)	1045	10.8	Electronic Properties of Two-Dimensional Systems	T. Ando, A. B. Fowler, F. Stern
PRB 13, 5188 (1976)	1023	20.8	Special Points for Brillouin-Zone Integrations	H. J. Monkhorst, J. D. Pack

PR, *Physical Review*; PRB, *Physical Review B*; PRL, *Physical Review Letters*; RMP, *Reviews of Modern Physics*.

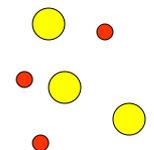
DFT gera uma **ferramenta computacional poderosíssima** para estudar a física da matéria condensada



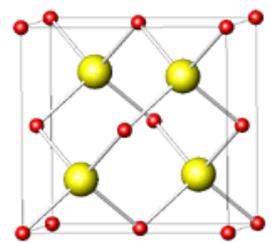
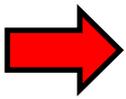
Laboratório virtual



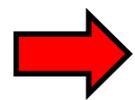
• Grupo de Materiais Semicondutores e Nanotecnologia- GMSN



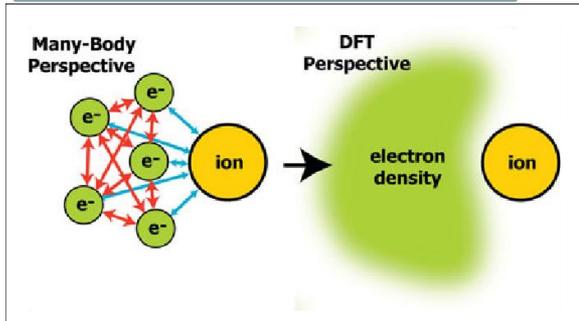
Átomos



Geometria



DFT



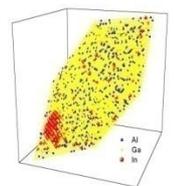
Cálculos



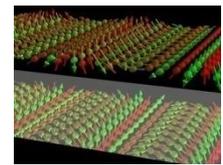
Propr. macroscópicas



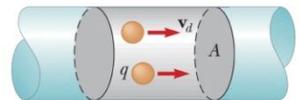
Termodinâmicas



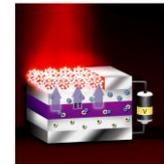
Magnetismo



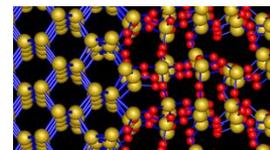
Condução



Interação c/ radiação



Estrutura cristalina



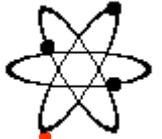
FIM primeira aula



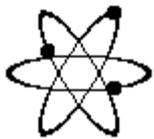
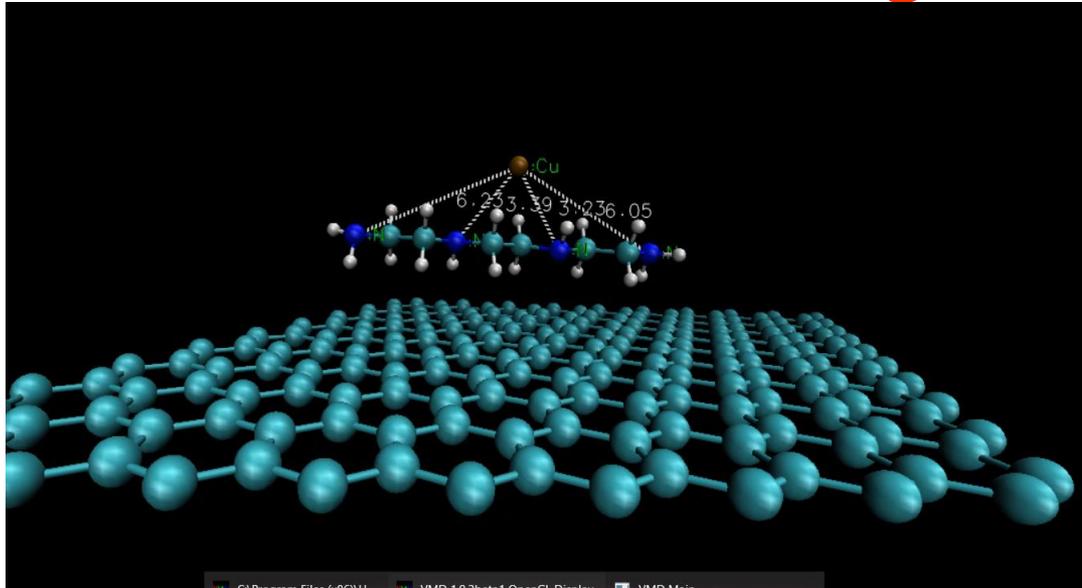
Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA)



XIII ENCONTRO DE FÍSICA DO ITA-2019



"Simulações computacionais: um laboratório virtual de nanotecnologia"



Marcelo Marques
Ivan Guilhon



Grupo de Materiais Semicondutores e Nanotecnologia-GMSN
Departamento de Física-ITA

Índice

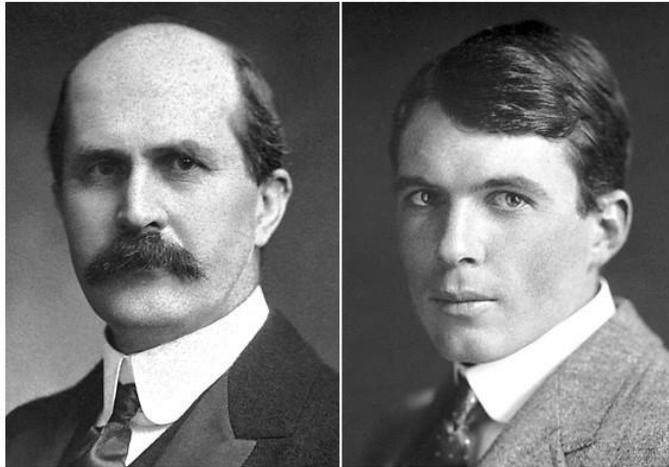
1- Sistemas em matéria condensada

2- Noção intuitiva de bandas

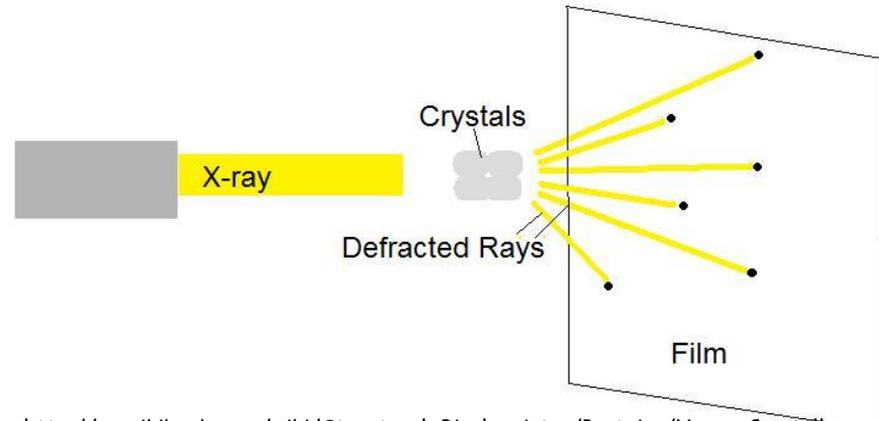
3- Resolvendo a equação tipo Schrödinger para um potencial periódico

4- O problema do gap em DFT

1-Sistemas em matéria condensada



Descoberta: Cristalografia por raios X-1913



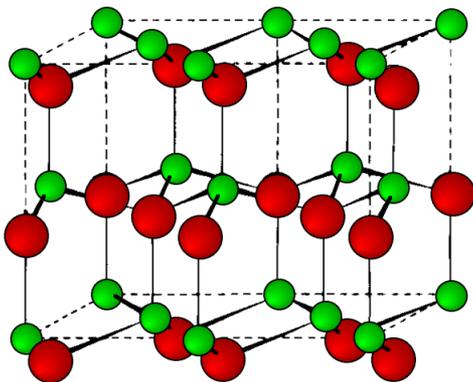
http://en.wikibooks.org/wiki/Structural_Biochemistry/Proteins/X-ray_Crystallography

W.H. Bragg (left) and W.L. Bragg (right)

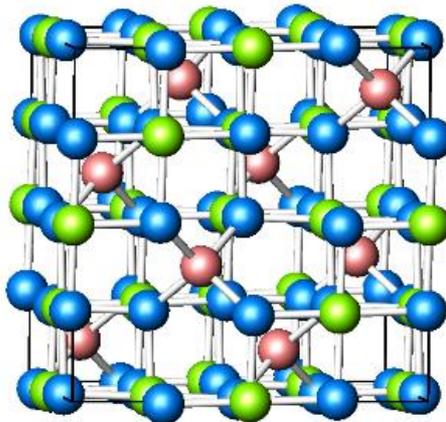
<http://the-gist.org/2014/04/hooray-for-crystallography/>



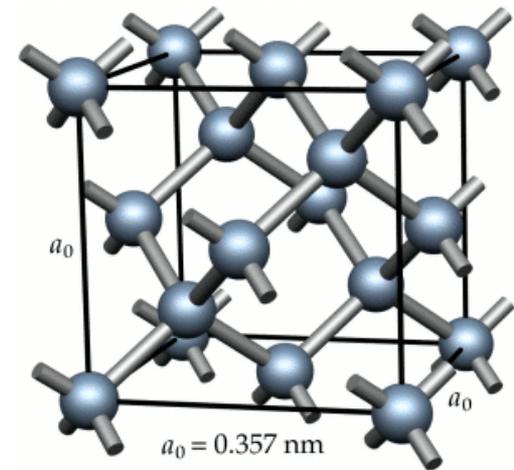
Eles descobriram que os sólidos podem ter arranjos de átomos extremamente ordenados com periodicidade: cristais



<http://cnx.org/content/m16927/latest/>

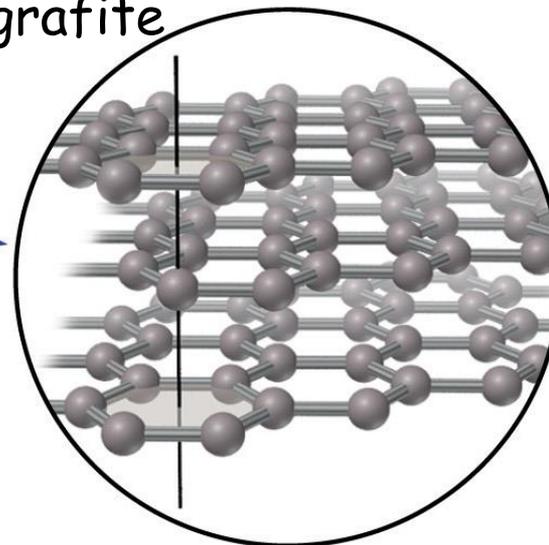
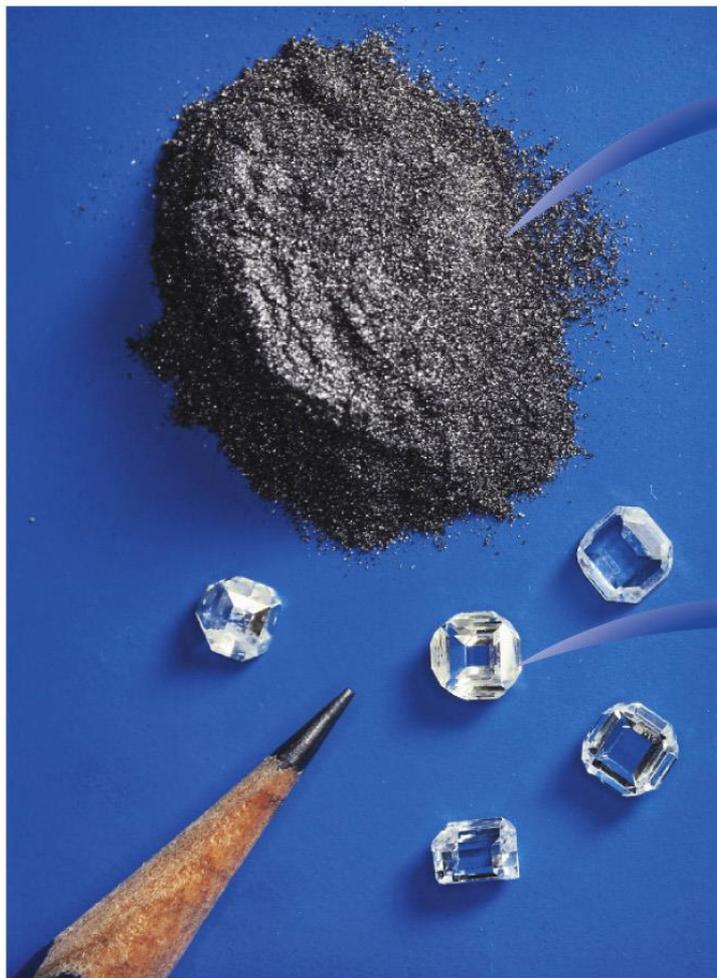


<http://wikis.lib.ncsu.edu/index.php/Spinel>
<http://worldscheapr.com/diamond-structure.html/diamond-crystal-structure>

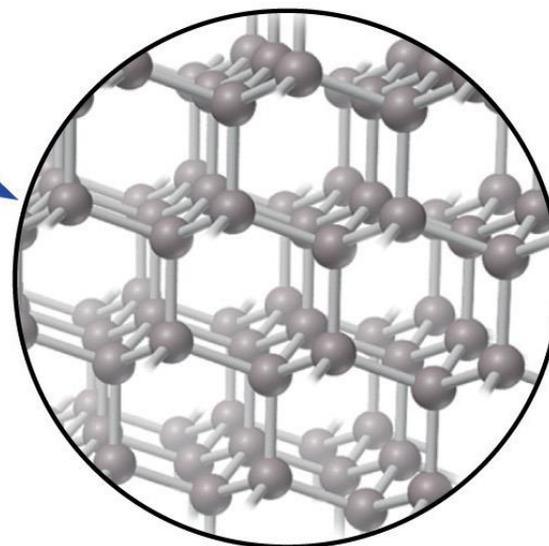


A estrutura tem um papel fundamental nas propriedades físicas da matéria sólida!

Exemplo :Diamante e grafite



(a)

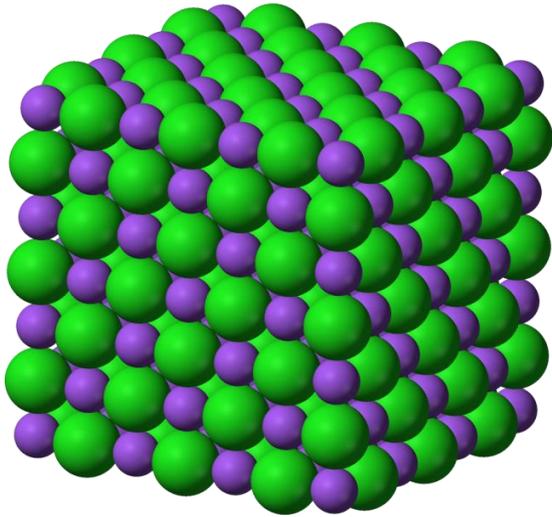


(b)

Os 7 estados da matéria condensada

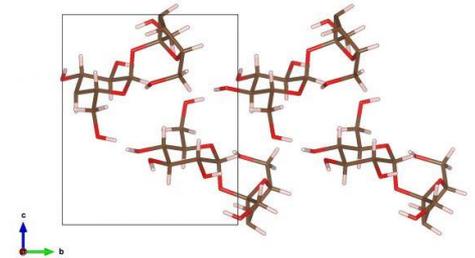
<https://mappingignorance.org/2018/04/26/the-7-states-of-condensed-matter-at-room-temperature/>

1-Atomic crystals



Atomic structure of a crystal of sodium chloride. Source: Wikimedia Commons

2-Molecular crystals

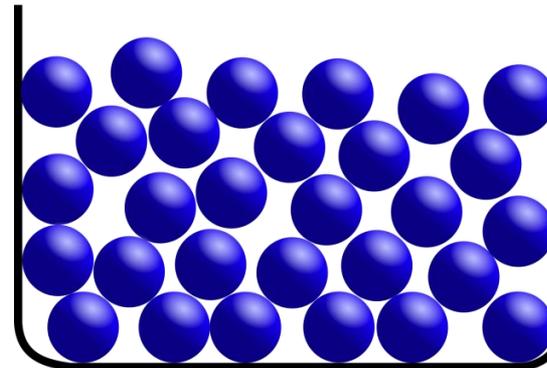


Sucrose crystals. Source: Wikimedia Commons

3-Liquids

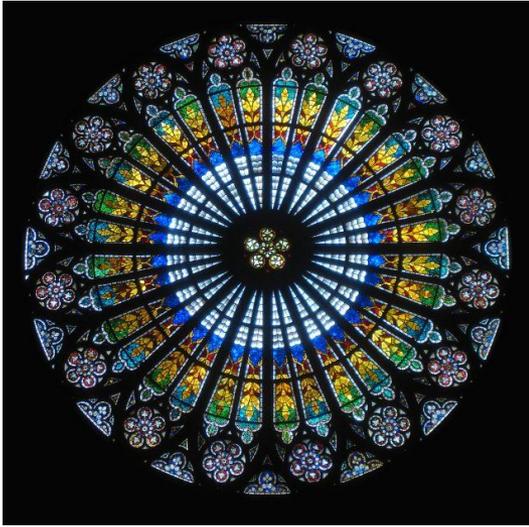


The formation of a spherical droplet of liquid water minimizes the surface area, which is the natural result of surface tension in liquids. Source: José Manuel Suárez / Wikimedia Commons

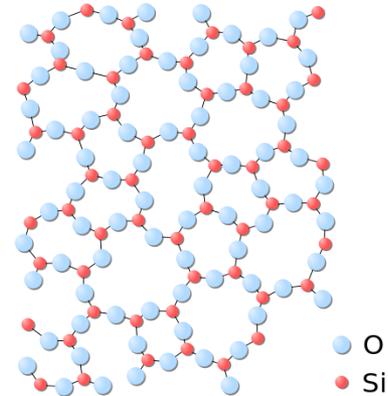


Structure of a classical monatomic liquid. Atoms have many nearest neighbors in contact, yet no long-range order is present. Source: Kaneiderdaniel / Wikimedia Commons

4-Amorphous solids and glasses



Interior of the rose at Strasbourg Cathedral. Source: Clostridium / Wikimedia Commons

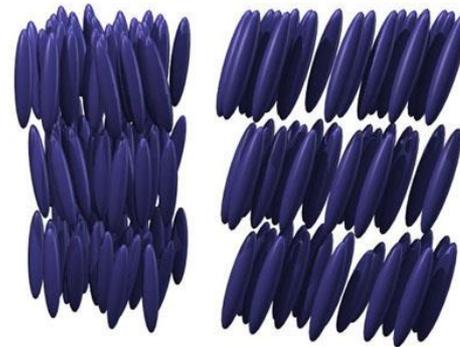


The amorphous structure of glassy silica (SiO_2) in two dimensions. No long-range order is present, although there is local ordering with respect to the tetrahedral arrangement of oxygen (O) atoms around the silicon (Si) atoms. Source: Jdrewitt / Wikimedia Commons

5-Liquid crystals

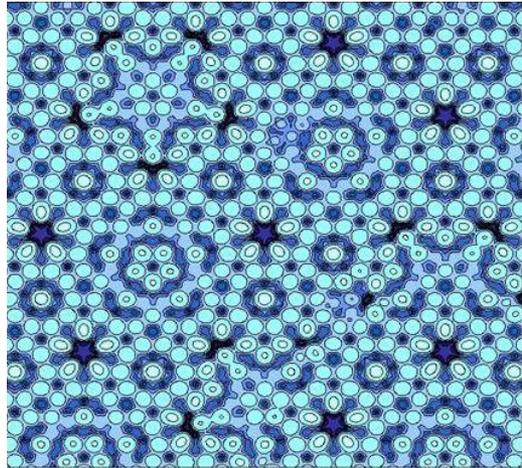


A Casio watch with a liquid crystal display (LCD). Source: Ricce / Wikimedia Commons



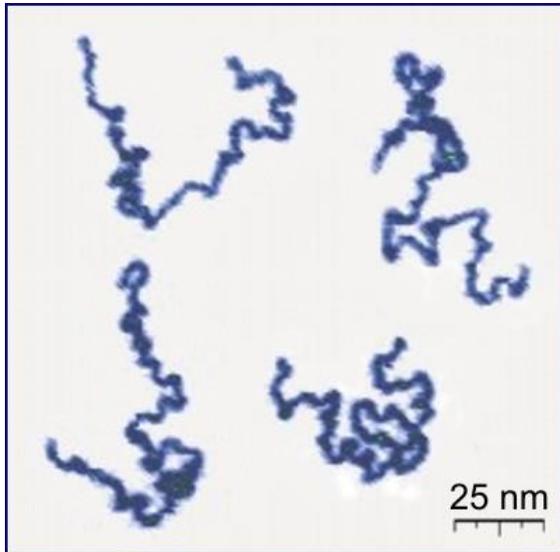
Schematic of alignment in the smectic phases. The smectic A phase (left) has molecules organized into layers. In the smectic C phase (right), the molecules are tilted inside the layers. Source: Kebes / Wikimedia Commons

6-Quasicrystals

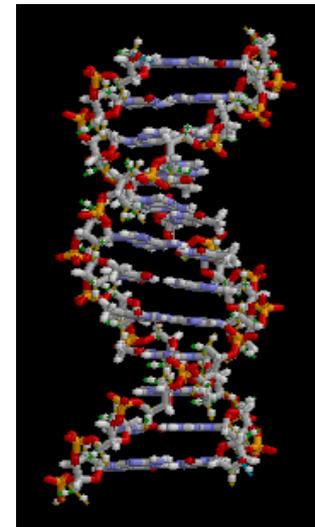


Atomic model of fivefold icosahedral-Al-Pd-Mn quasicrystal surface. Source: J.W. Evans, The Ames Laboratory - US Department of Energy

7-Polymers



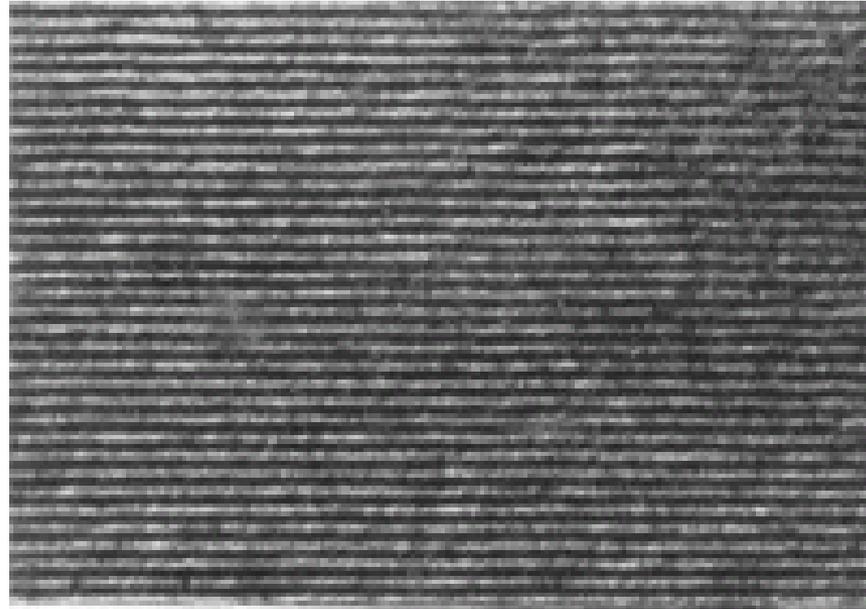
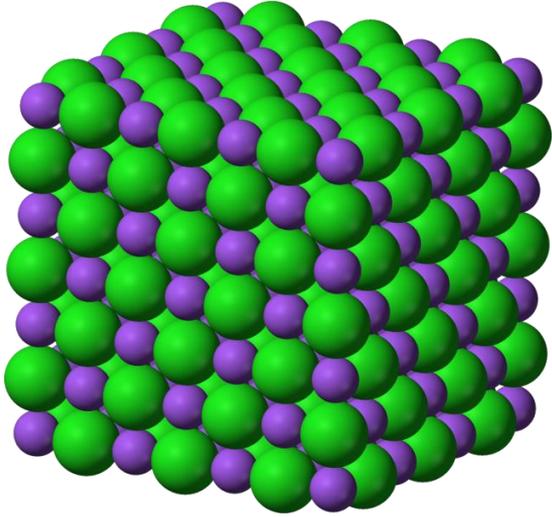
Appearance of real linear polymer chains as recorded using an atomic force microscope on a surface, under liquid medium. Chain contour length for this polymer is ~ 204 nm; thickness is ~ 0.4 nm. Source: Y. Roiter and S. Minko (2005) AFM Single Molecule Experiments at the Solid-Liquid Interface: In Situ Conformation of Adsorbed Flexible Polyelectrolyte Chains, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 127, iss. 45, pp. 15688-15689 .



Microstructure of part of a DNA double helix biopolymer. Source: Wikimedia Commons

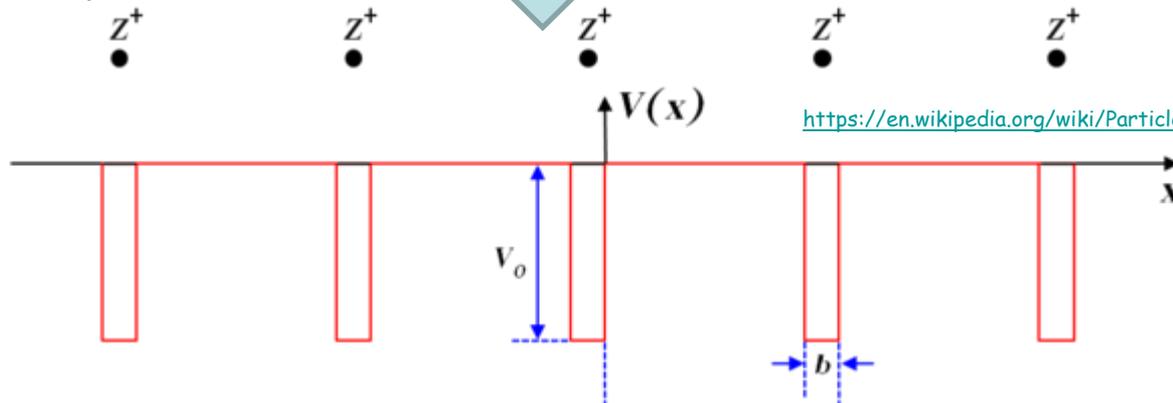
Vamos nos preocupar aqui com o primeiro caso apenas.....

Atomic crystals



Part of a perfect crystal of platinum phthalocyanine seen under the electron microscope with a magnification of 1,500,000 times
<https://www.technology.umd.edu/article/1/3/93-93/>

Essência: periodicidade



2- Noção intuitiva de bandas

The screenshot shows the PhET website interface. At the top, there is a browser tab bar with several open tabs including 'Entrada', 'Desmonta', 'Microsoft', 'electron', 'parallel w', 'My public', 'Altmetric', 'Three-dim', 'Chemical', and 'Novas'. Below the tabs is the address bar with the URL 'https://phet.colorado.edu/pt_BR/simulations/category/new'. The main header features the PhET logo (PhET INTERACTIVE SIMULATIONS) on the left, a search bar in the center, and the University of Colorado Boulder logo on the right.

Simulações

- ▶ Novas Sims
 - HTML5
 - Física
 - Biologia
 - Química
 - Ciências da Terra
 - Matemática
 - Por Nível de Ensino
 - Por Dispositivo
 - Todas as Sims
 - Traduzir Sims

Recursos para Professores

- Pesquisa
- Accessibility
- Doar

PhET Quick Tips

Seja um herói HTML5!

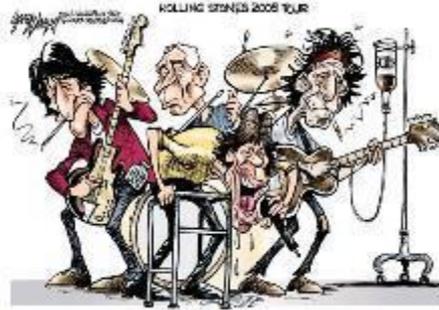
Ao converter nossas sims para HTML5, tornamo-las facilmente disponíveis em várias plataformas e dispositivos. Se você tiver laptops, iPads, chromebooks, ou BYOD, suas Sims PhET favoritas estarão sempre na ponta dos dedos. Torne-se hoje parte de nossa missão, e transforme as experiências de aprendizagem dos alunos de todos os lugares!

DOE

Novas Sims

- Massas e Molas: Básico
- Formas de Energia e Transformações
- Interferência de Onda

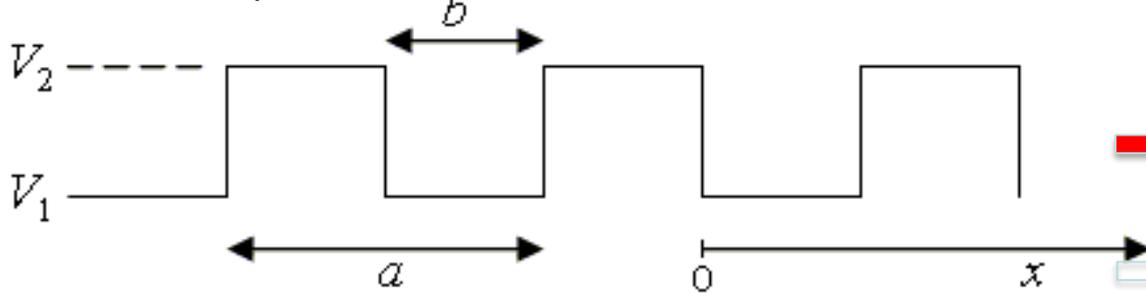
Below the 'Novas Sims' section, there are three more simulation thumbnails, each with a 'NEW!' banner, showing a balance scale, a balance scale with weights, and a balance scale with weights.



<https://www.cagle.com/news/rollingstones/>

$$H\psi = E\psi$$

Potencial periódico

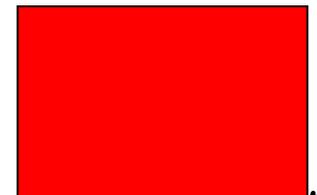
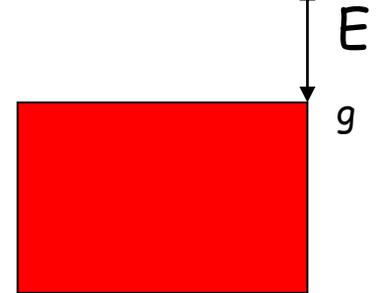


→ Estado ocupado
 Estado desocupado

Energia

Contínuo Energias possíveis

Contínuo Energias não possíveis

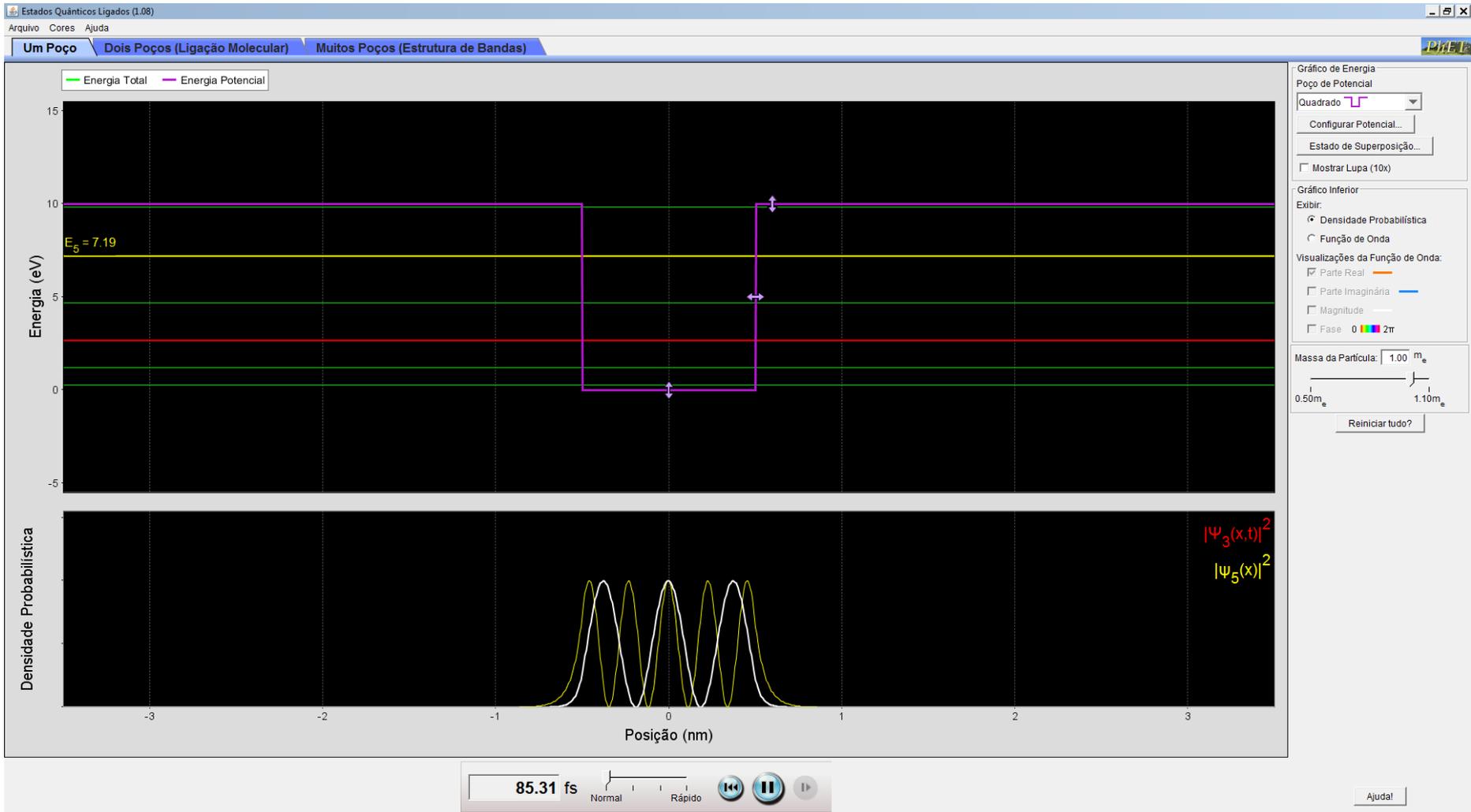


E
g

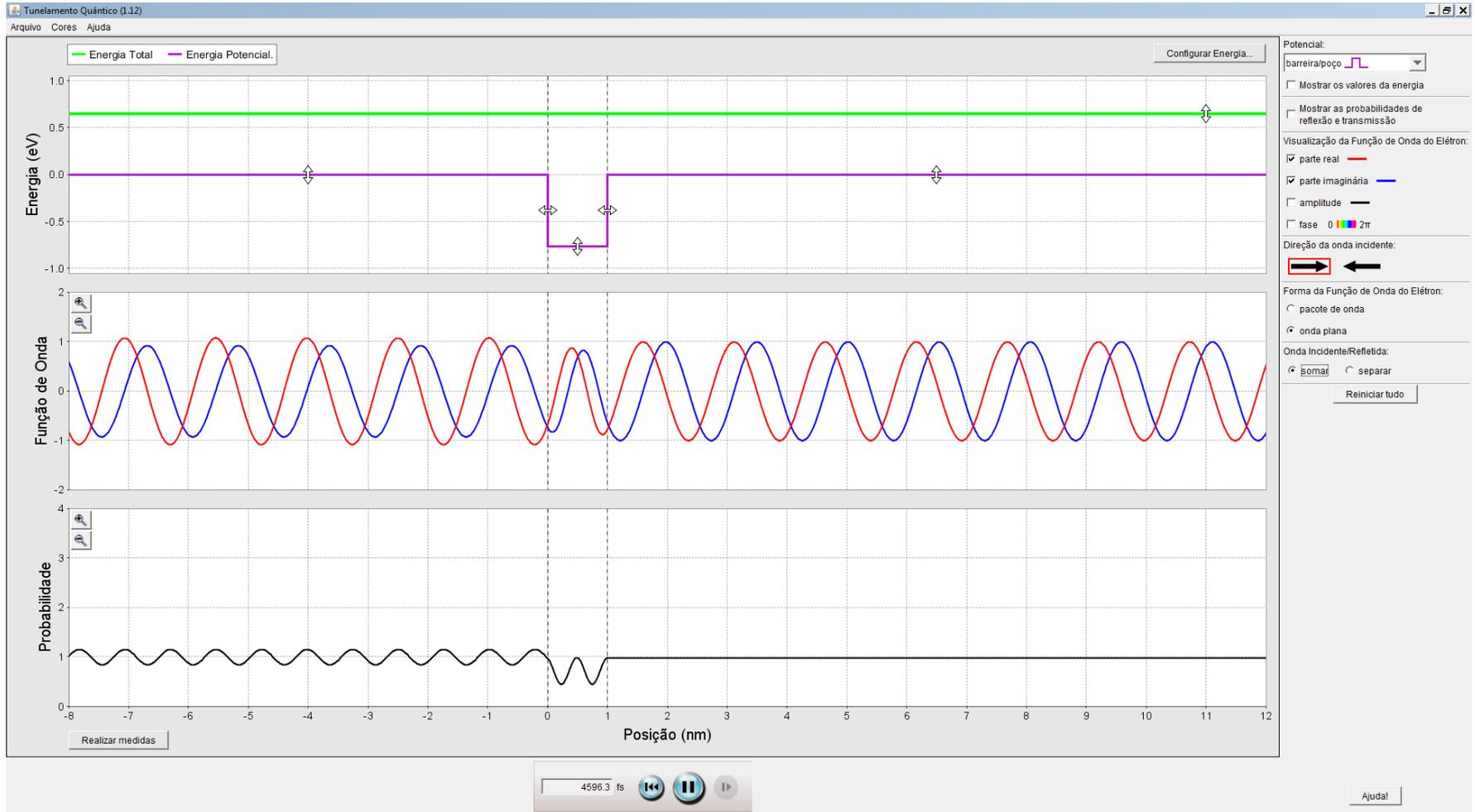
posição

Só com esta solução, temos qualitativamente a física para entendermos as propriedades de materiais e de dispositivos eletrônicos!

Começamos nosso modelo quantitativo- Poço quântico : níveis quantizados e localizados

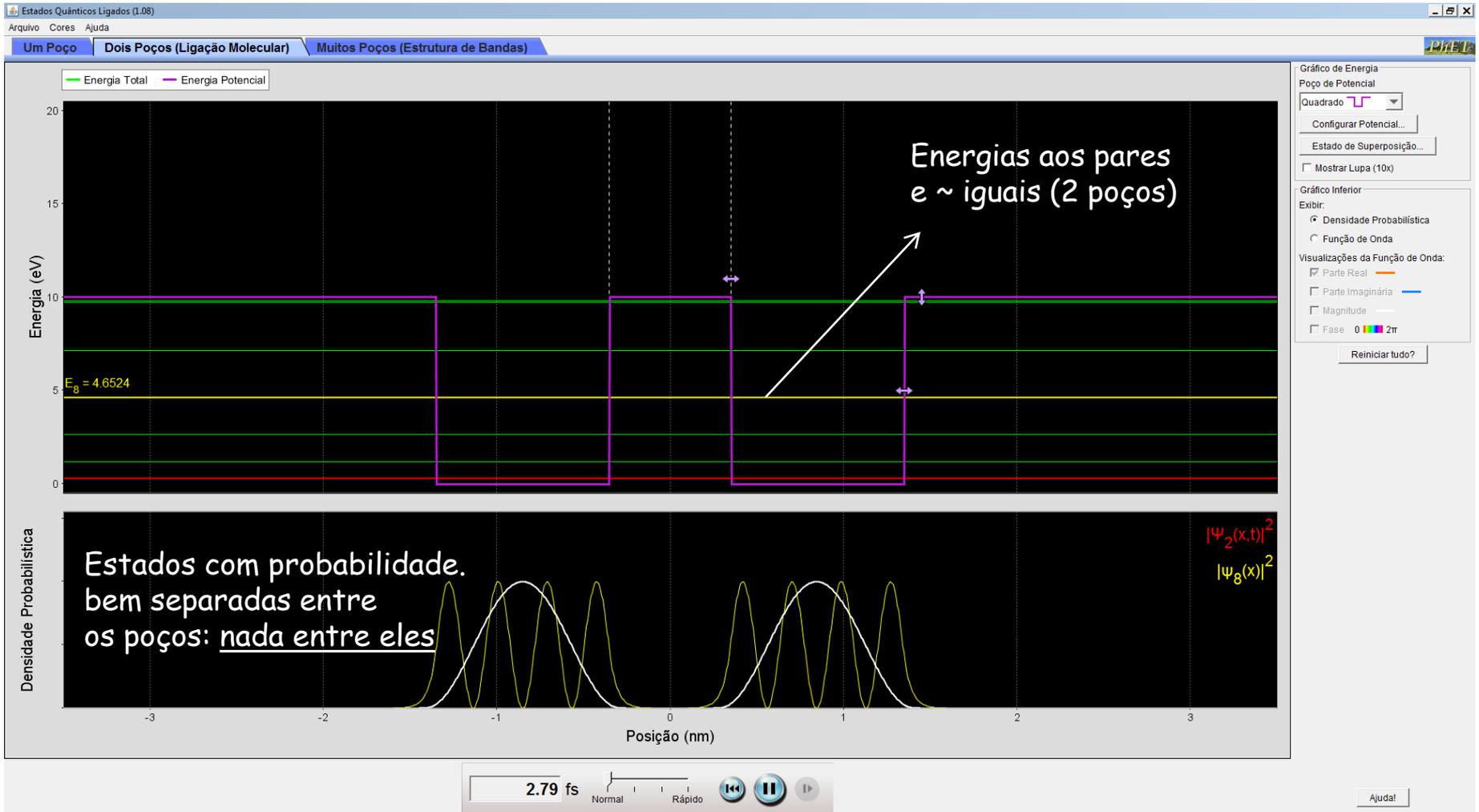


Mas para energia acima da barreira: espectro de energia contínuo e estados deslocalizados

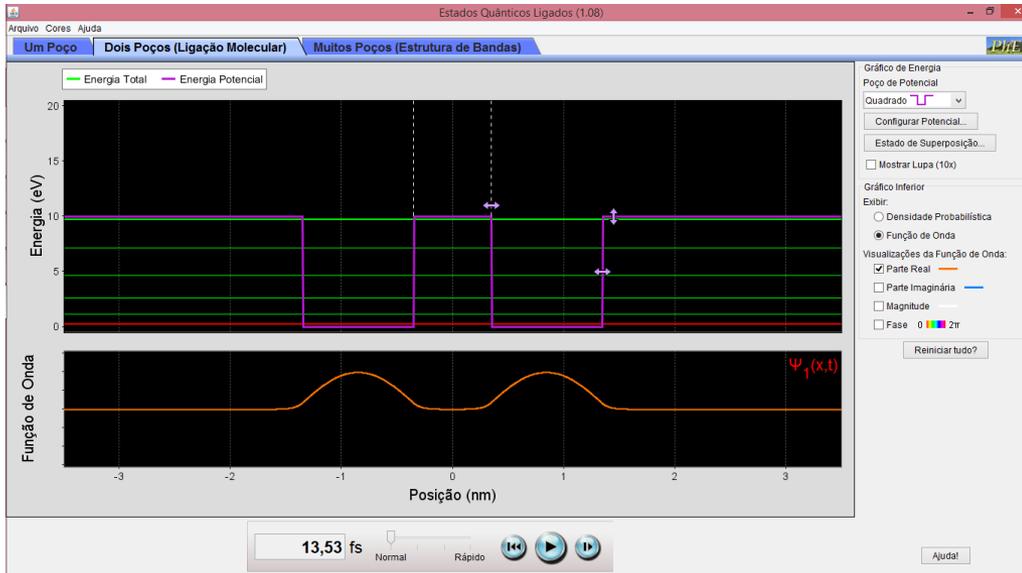


Dois poços acoplados (ligação molecular)

a) Poços separados



Energia 1



(i) Soluções são simples combinações lineares das soluções dos poços isolados

(ii) Energias são aproximadamente as mesmas

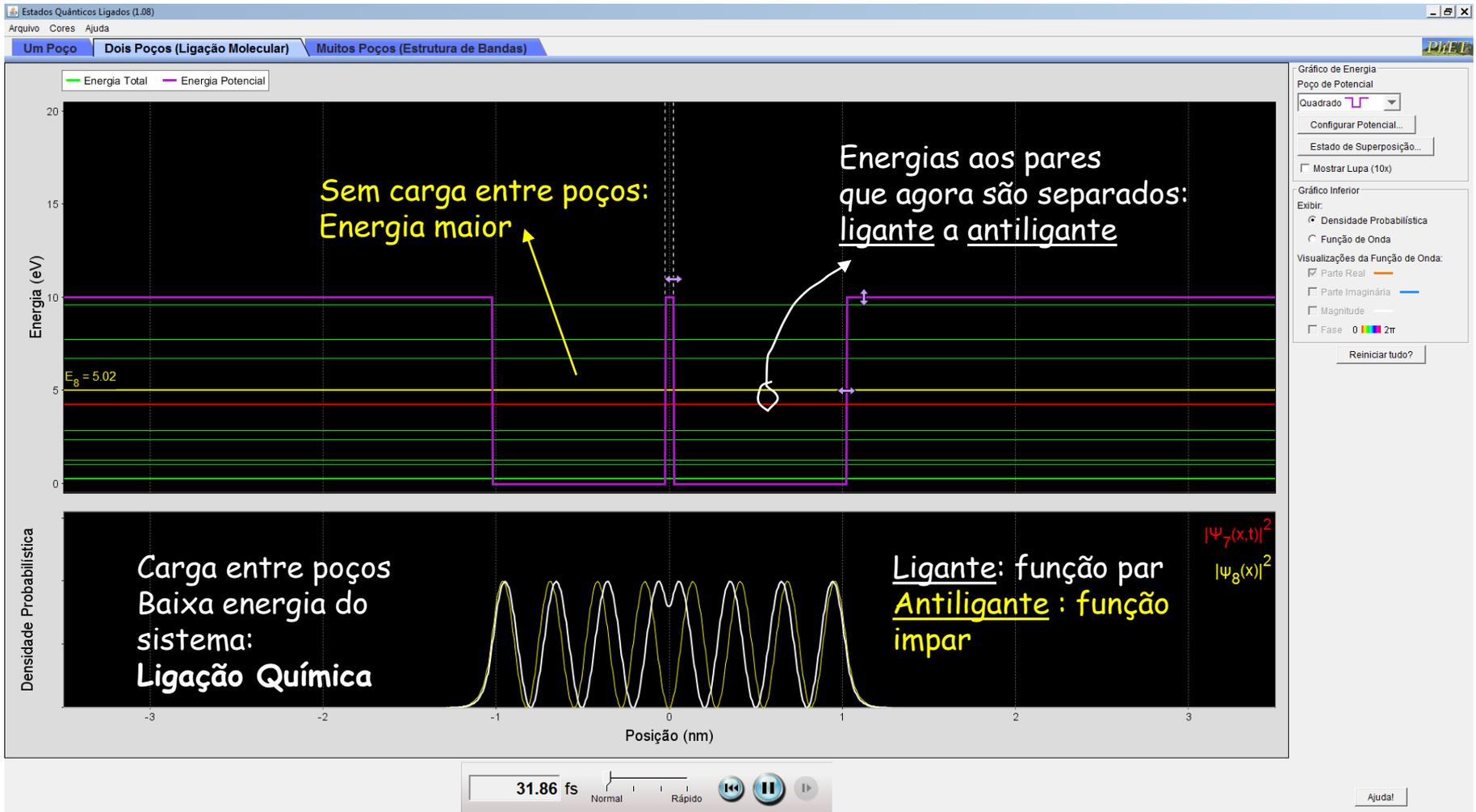
Energia 2



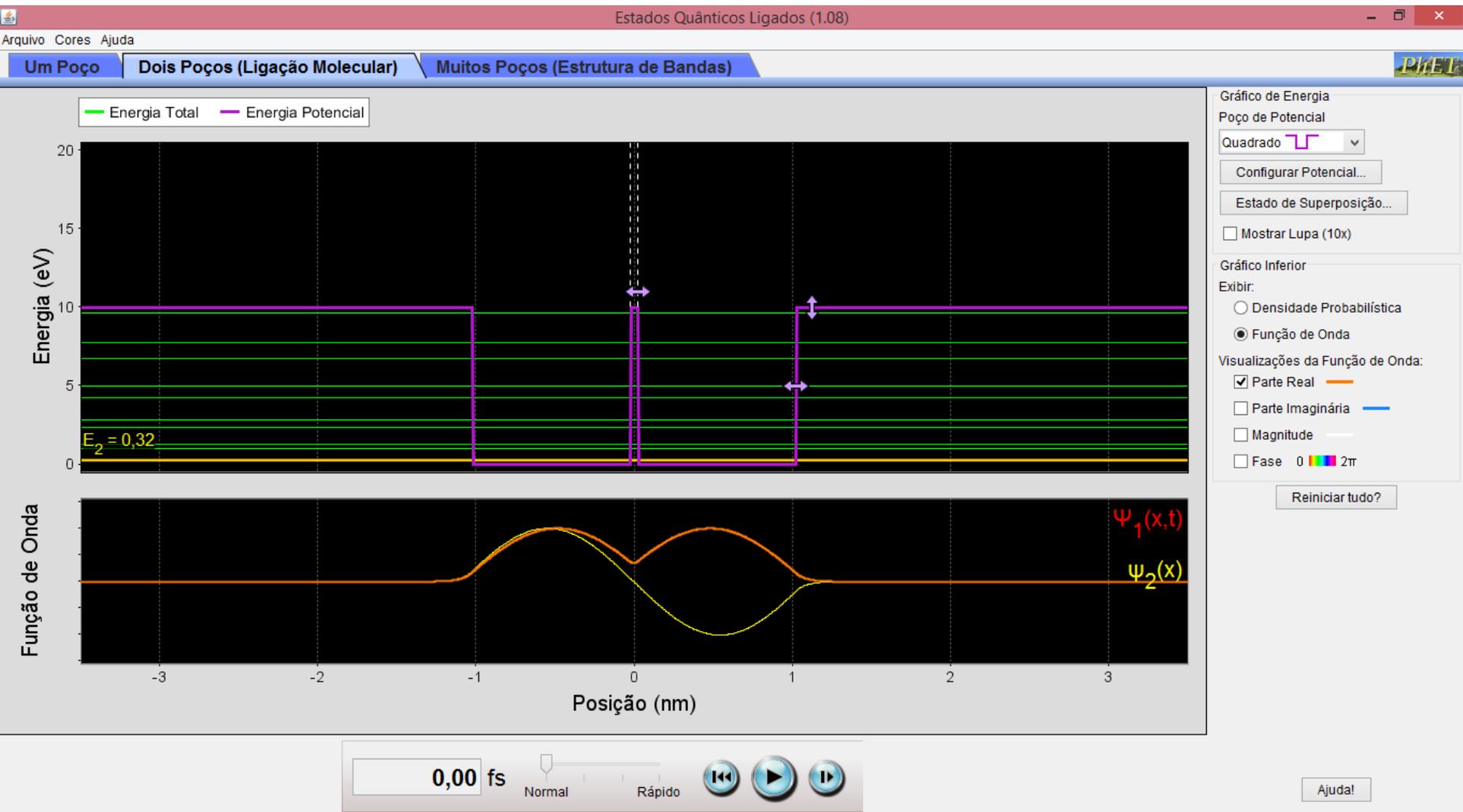
(iii) "Mundos separados" que não se enxergam

Mas tudo muda quando aproximamos as coisas.....

b) Poços próximos



Agora as coisas mudam!

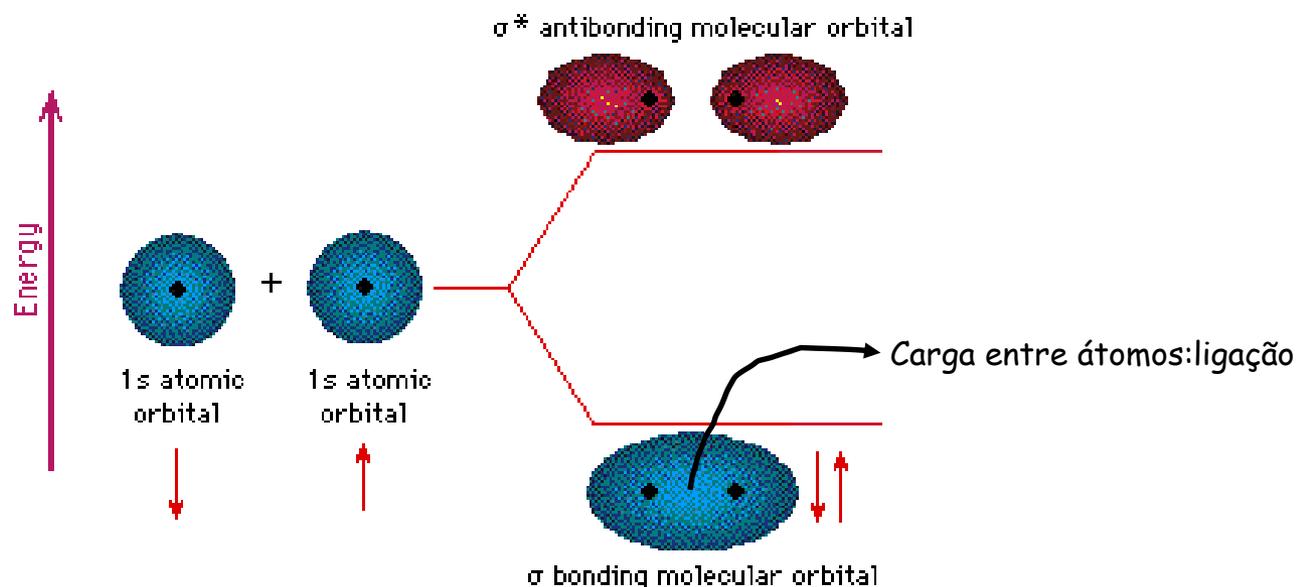


- (i) Soluções não são simples combinações lineares dos poços isolados
- (ii) Combinações de soluções exponenciais levam a energias diferentes

Poço "default" do programa, mantendo-se a altura e a largura

autovalor	Poços separados	Poços próximos
5	2,64549 eV	2,38 eV
6	2,64555 eV	2,84 eV

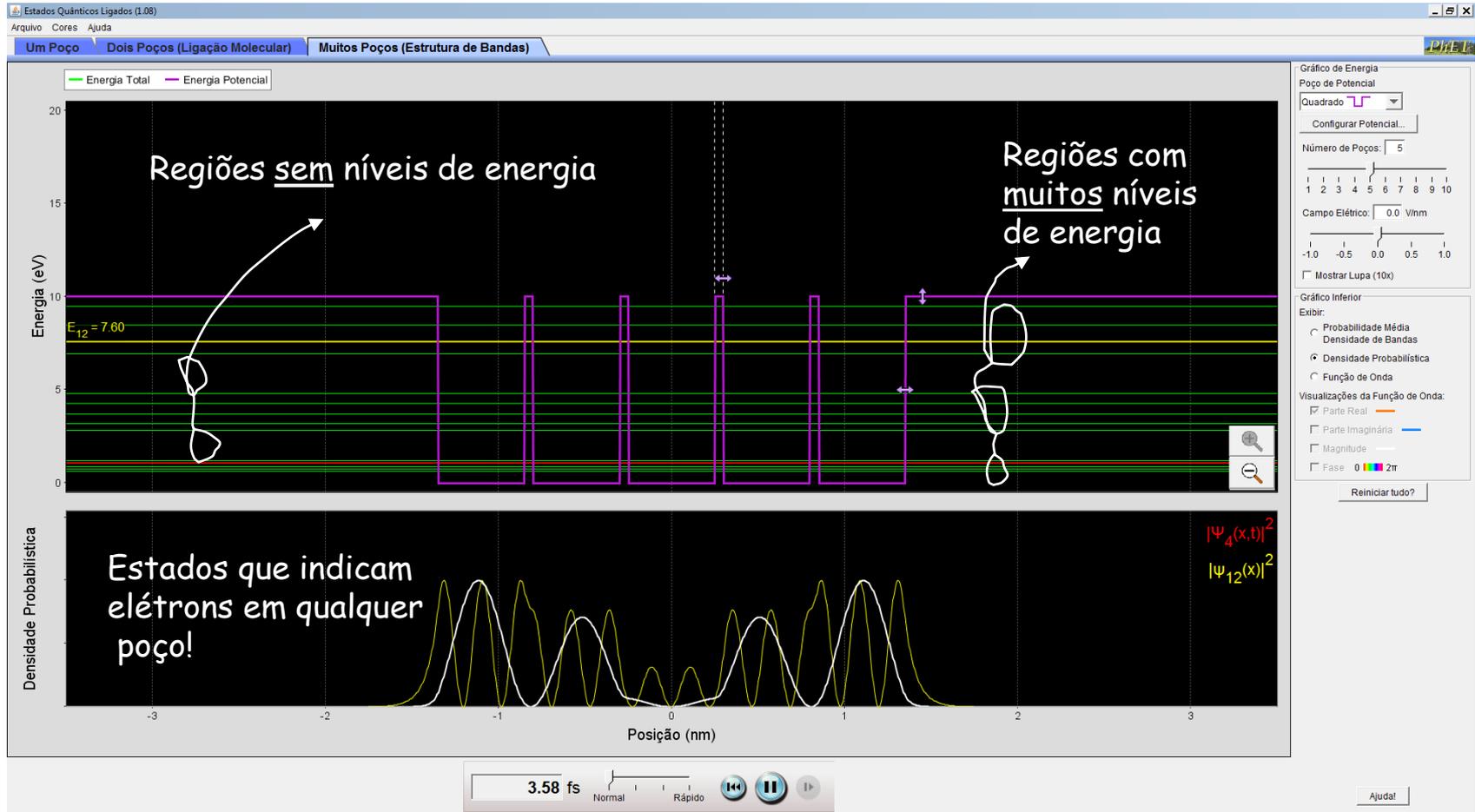
Exemplo:



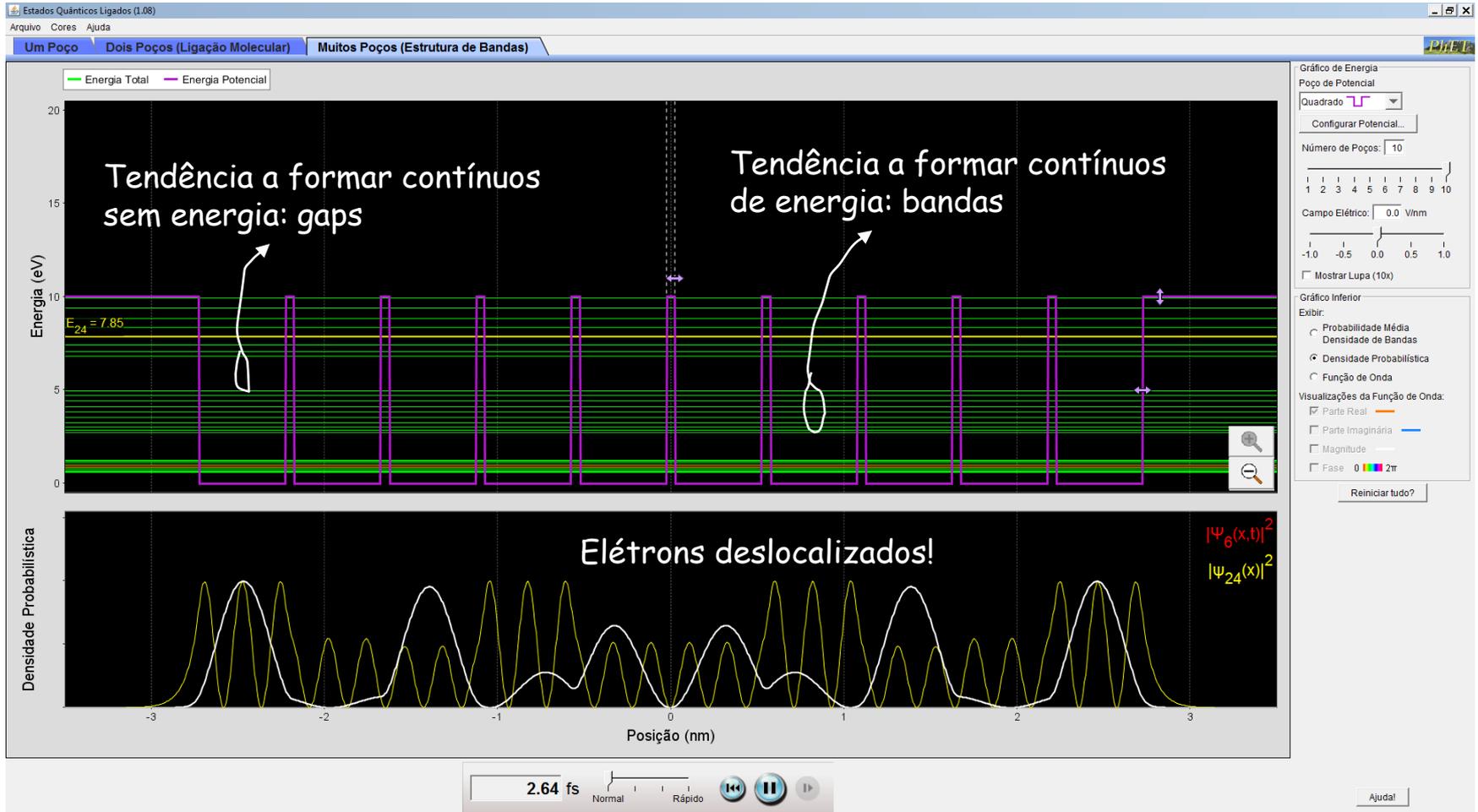
E temos uma ligação química !



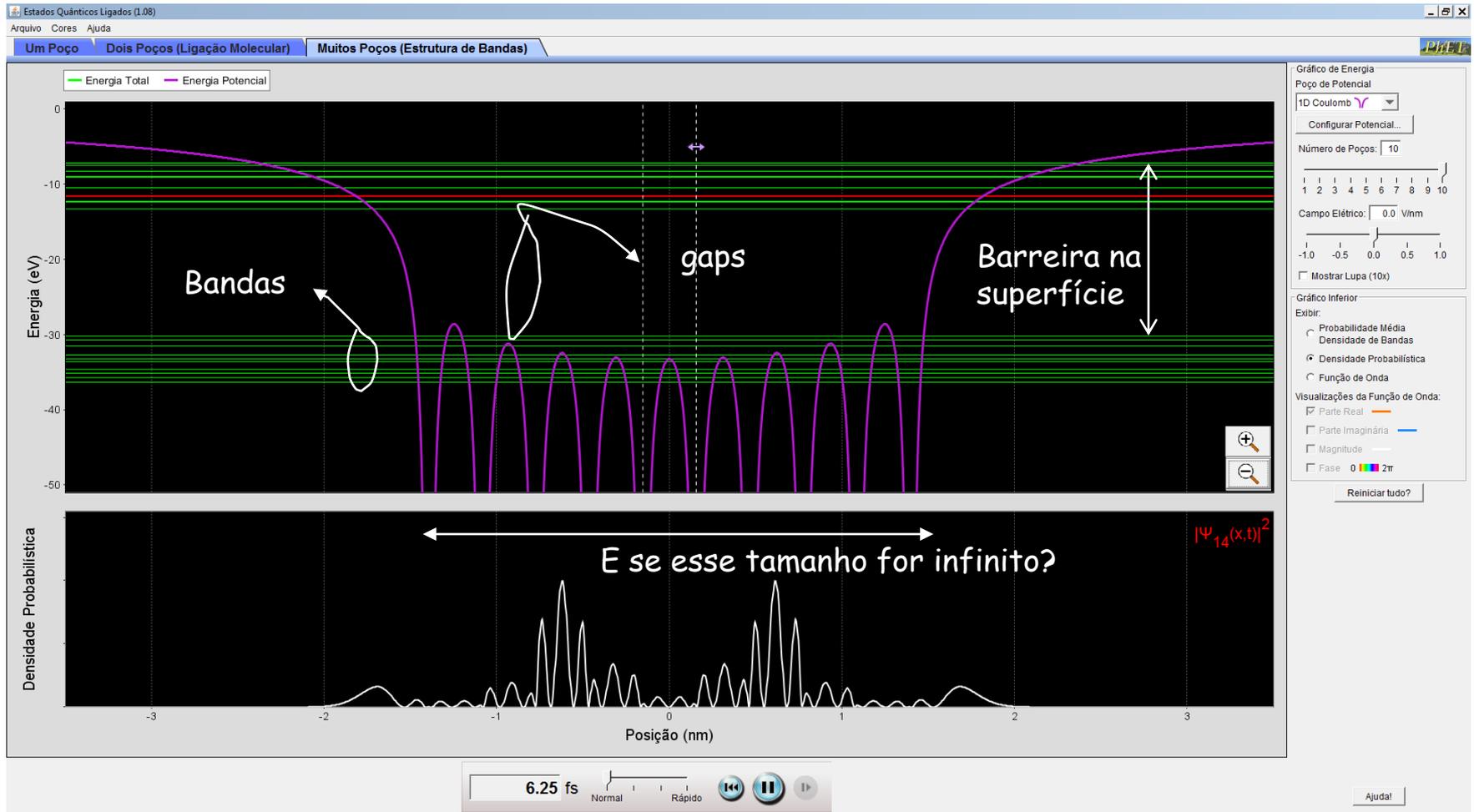
E se tivermos muitos poços juntos a pequena distância de separação entre eles?



Duplicando o número de poços



Vamos pensar agora no mesmo problema, mas com o potencial mais próximo do potencial sentido por elétrons em átomos (Potencial Coulombiano 1D)



Semicondutores



silício

Isolantes

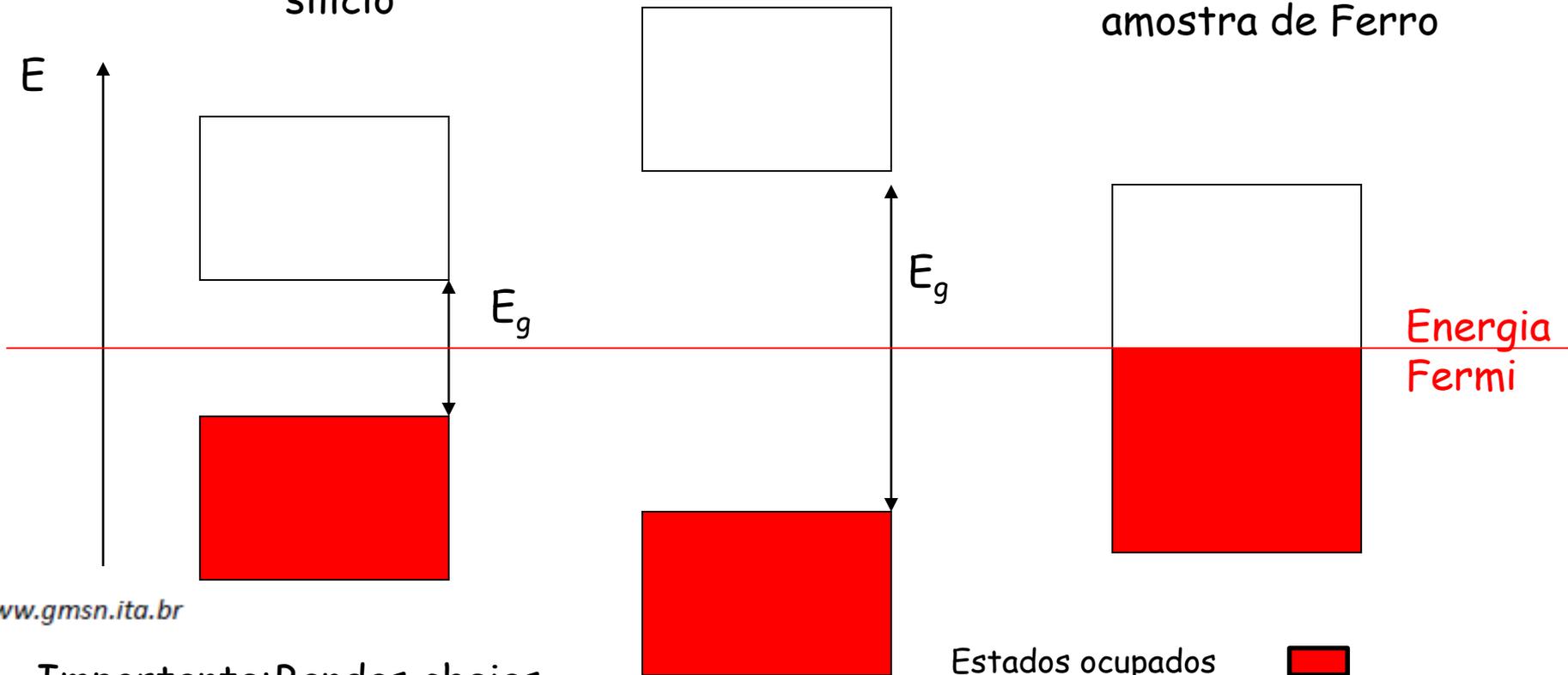


diamante

Metais



amostra de Ferro

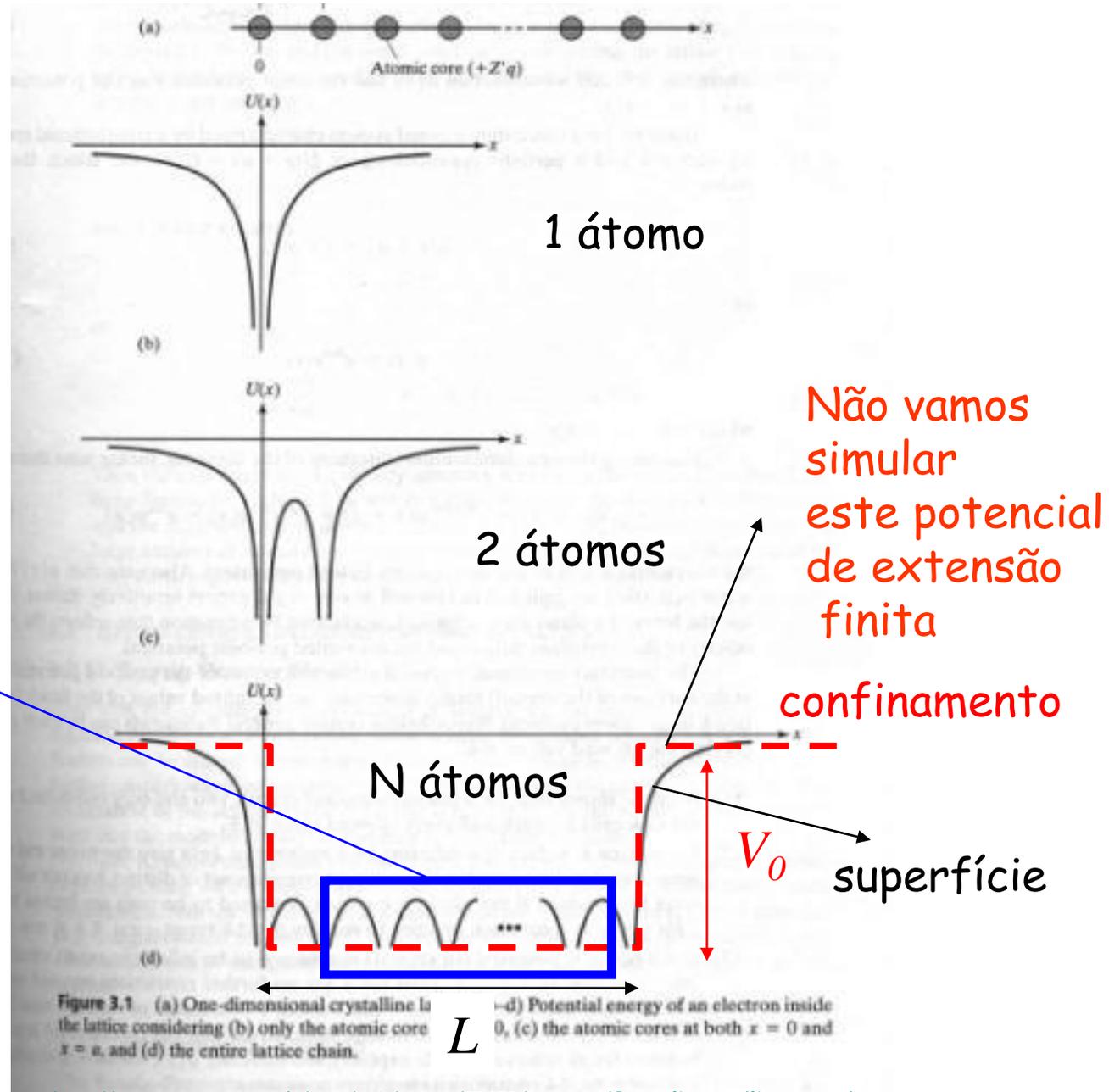


www.gmsn.ita.br

Importante: Bandas cheias ou vazias não conduzem

Estados ocupados
 Estados desocupados

Ok, mas materiais reais tem superfície...

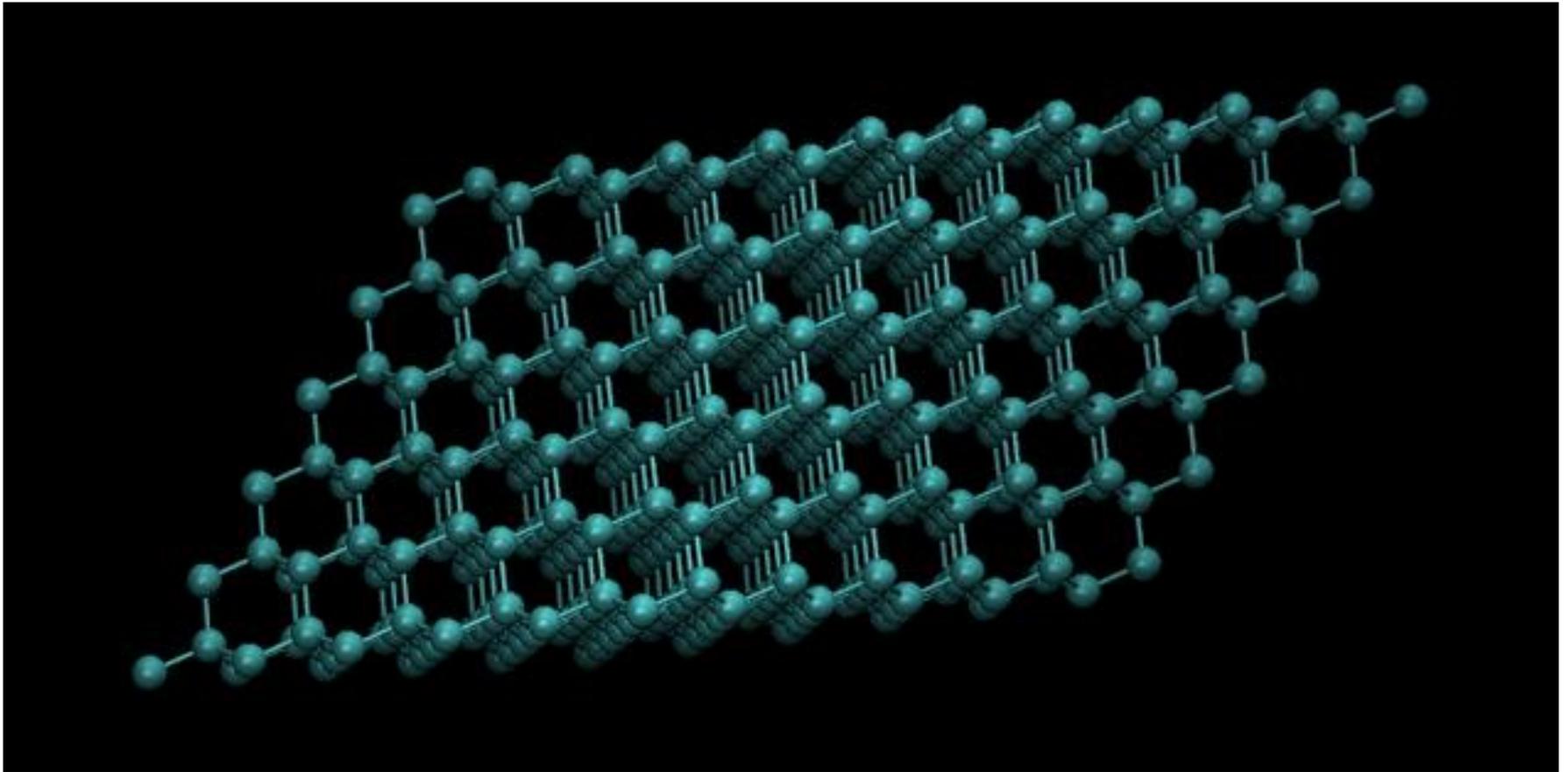


(i) Vamos simular um potencial periódico que aproximamos como sendo de extensão infinita (a borda não tem efeito!)

(ii) assumimos $V(x)=V(x+a)$
Sendo "a" qualquer translação que leve o sistema a uma das infinitas posições equivalentes

Figure 3.1 (a) One-dimensional crystalline lattice considering (b) only the atomic core at $x = 0$, (c) the atomic cores at both $x = 0$ and $x = a$, and (d) the entire lattice chain.

Ok, próximo passo: Resolvendo a equação de Schroedinger no sólido explicitamente



Mas o cristal vibra....e ai?



Aproximação de Born-Oppenheimer

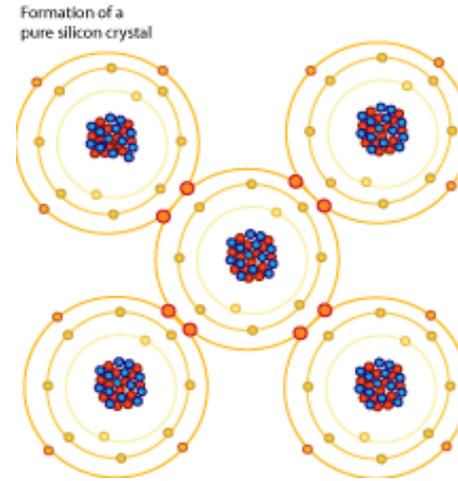
Born, Max; Oppenheimer, J. Robert (1927). "Zur Quantentheorie der Molekeln", Annalen der Physik 389 (20): 457–484. http://abinitio.iehk.rwth-aachen.de/glossar/?text_id=99&division=Array&scale=Array

Dividimos então a FMC em dois tipos de problemas:

(i) Dinâmica de elétrons em núcleos fixos (energia total, magnetismo, optica,etc)

$$\frac{m}{M} \sim 10^{-5} \downarrow$$

Energia típica de elétrons: 1-10 eV (temperatura ambiente é muito Fria para elétrons)

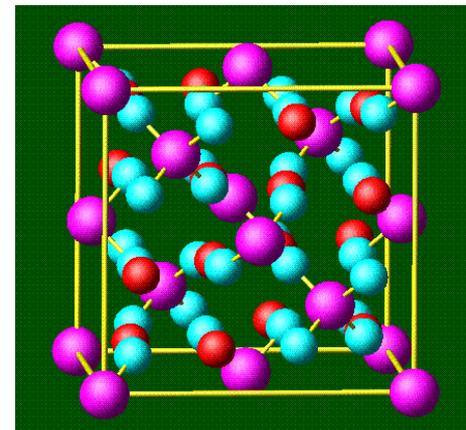


https://www.123rf.com/photo_4526933_crystal-lattice-consist-of-gold-spheres-and-silver-ties.html

(ii) Dinâmica de núcleos (vibrações da rede, difusão atômica,etc)

$$\frac{m}{M} \sim 10^{-5} \downarrow$$

Energia típica de elétrons: 0,01-0,1 eV (temperatura ambiente é quente para dinâmica dos núcleos)



<http://www.computingformaterials.com/phoncfm/2demo510.html>

Equação de Kohn-Sham



$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_H(\vec{r}) + V_{ext}(\vec{r}) + V_{TC}(\vec{r}) \right] \psi_k(\vec{r}) = E \psi_k(\vec{r})$$

Mas mesmo a Resolução numérica da equação em sólidos é uma tarefa difícilíssima: PAW
LAPW, Pseudopotencial, PP ultra suaves, etc.

Energia de troca + correlação
LDA
GGA
etc

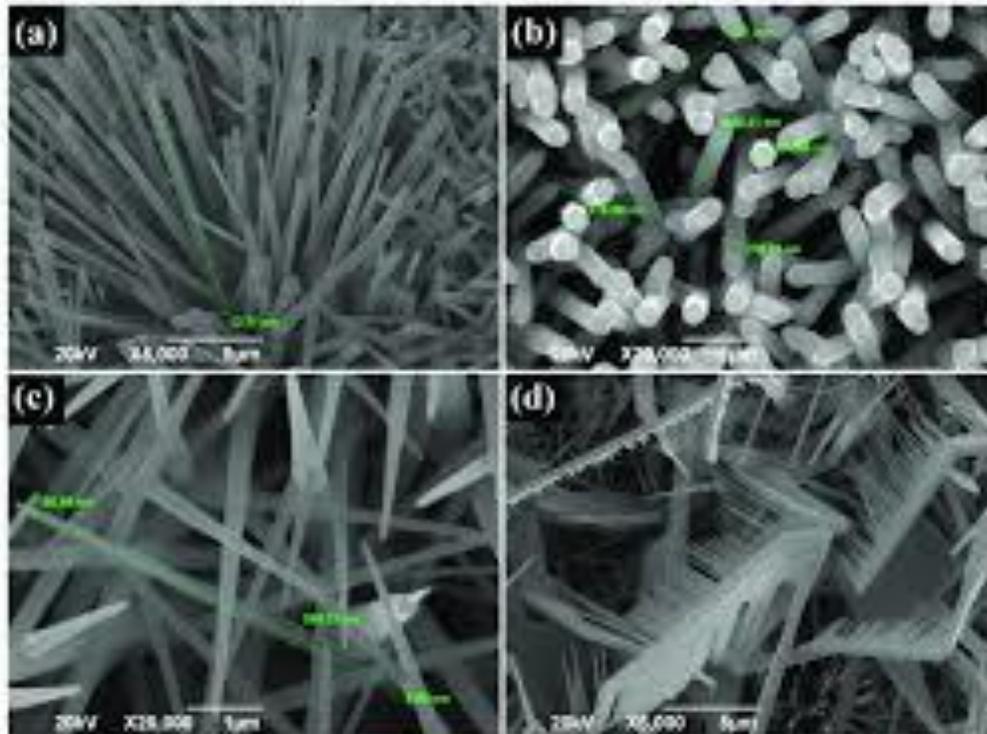
Available Electronic Structure Codes

USPEX	Vanderbilt Ultra-Soft Pseudopotential	CASTEP	CPMD Program			
DOD-Plane Wave	VASP	FHIImd	ABINIT Software Project	PWSCF	Siesta	
Conquest	LMT0	ASW	FLEUR	DOD-Parallel Tight-Binding Molecular Dynamics		
CAMPOS	PsiMag Software Repository		Octopus	CASINO	FPLO	
Wien2K	Atomistix ToolKit	Crystal	Band	xband	SPR-KKR	SPR-TB-KKR
Exciting	ELK	Onetep	TITUS codes	PEtot	BigDFT	
PHON	YAMBO	JDFTx	WANNIER	Virtual NanoLab		

Vamos lá, simplificamos muito com DFT, mas a tarefa ainda é difícilíssima

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{KS}(\vec{r})\right]\psi_i(\vec{r}) = E_i\psi_i(\vec{r})$$

Potencial gerado por estruturas complexas como estas....



Scanning electron microscopy (SEM) images of ZnO nanomaterials grown on silicon substrate. (a) ZnO nanowires (ZNWs), (b) ZnO nanorods with hexagonal crystal structure, (c) ZnO nanoneedles, (d) ZnO nanocombs.

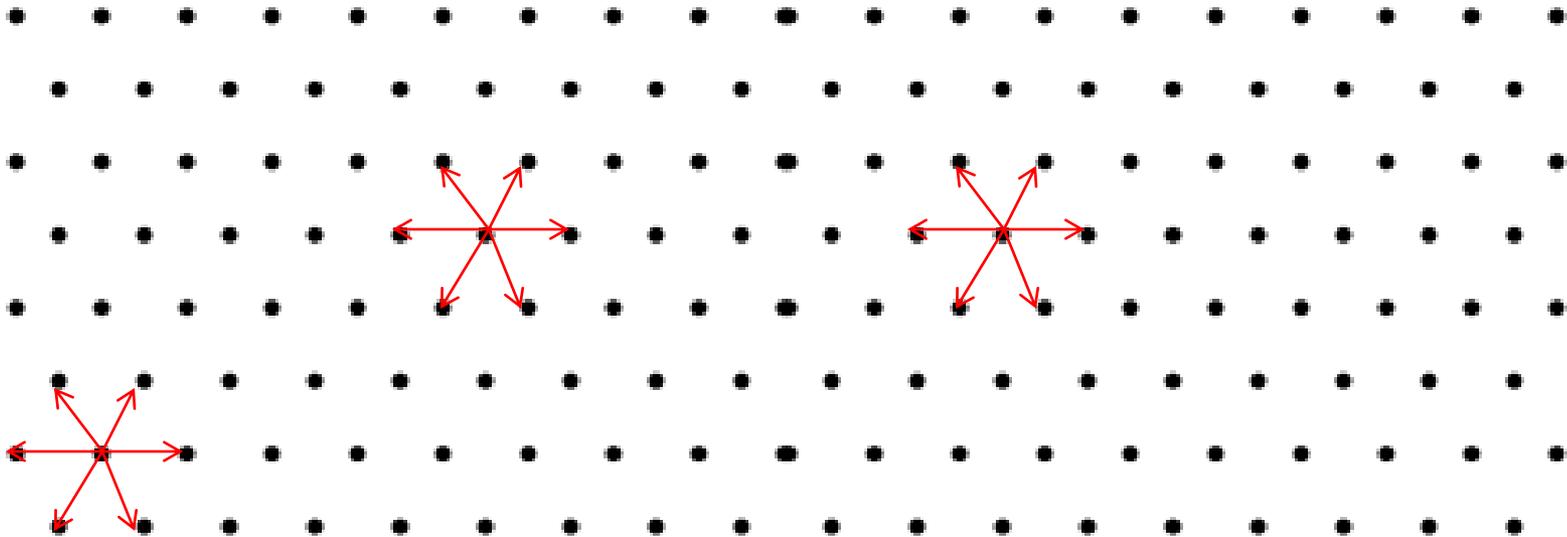
Estrutura matemática da periodicidade de um cristal



Auguste Bravais (c. 1850)

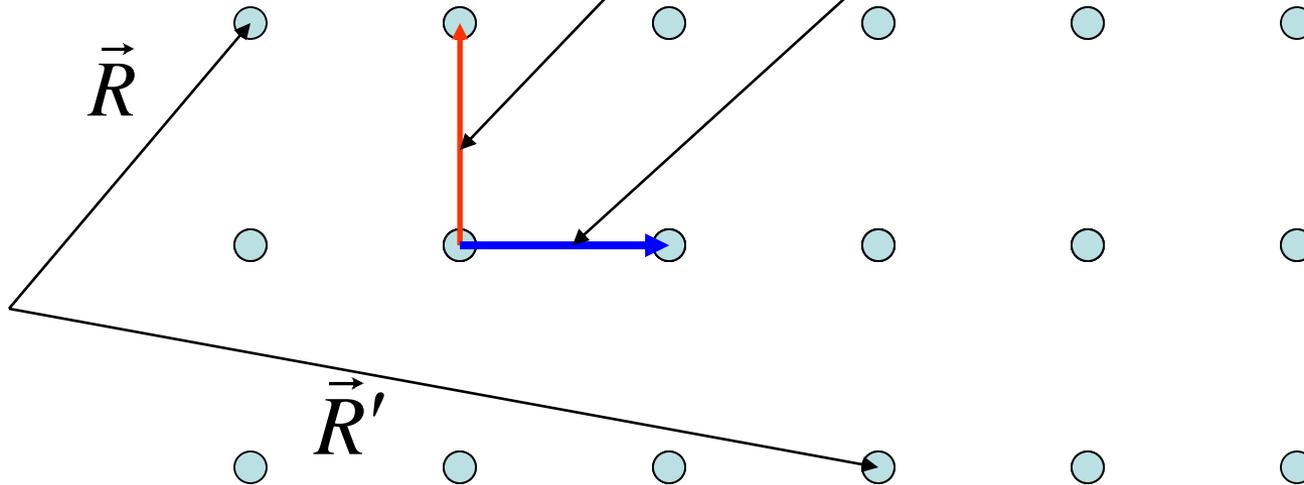
Para este estudo, introduzimos a chamada
REDE DE BRAVAIS

Definição 1: Conjunto discreto de pontos no espaço que formam uma estrutura periódica, de forma que cada ponto vê exatamente o mesmo arranjo que qualquer outro: esta rede necessariamente é infinita. Exemplo:



Esta rede de pontos pode ser obtida a partir da definição de certos vetores:

$$\vec{R}' = \vec{R} + n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$



Enfatizando: A rede inteira pode ser obtida escolhendo todas as combinações possíveis de inteiros n_1 , n_2 , e n_3

Segundo conceito importante para redes de Bravais: Célula Primitiva

Definição: Menor célula em comprimento (1D), área (2D), ou volume (3D) que pode ser definida para uma dada rede. Uma célula primitiva contém **somente um ponto** da rede de Bravais.

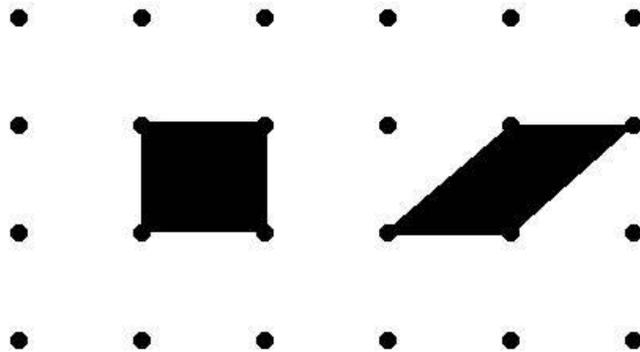


Figura copiada do livro N. W. Ashcroft e N. D. Mermin, *Solid State Physics*, New York: Saunders College Publishers, 1976.

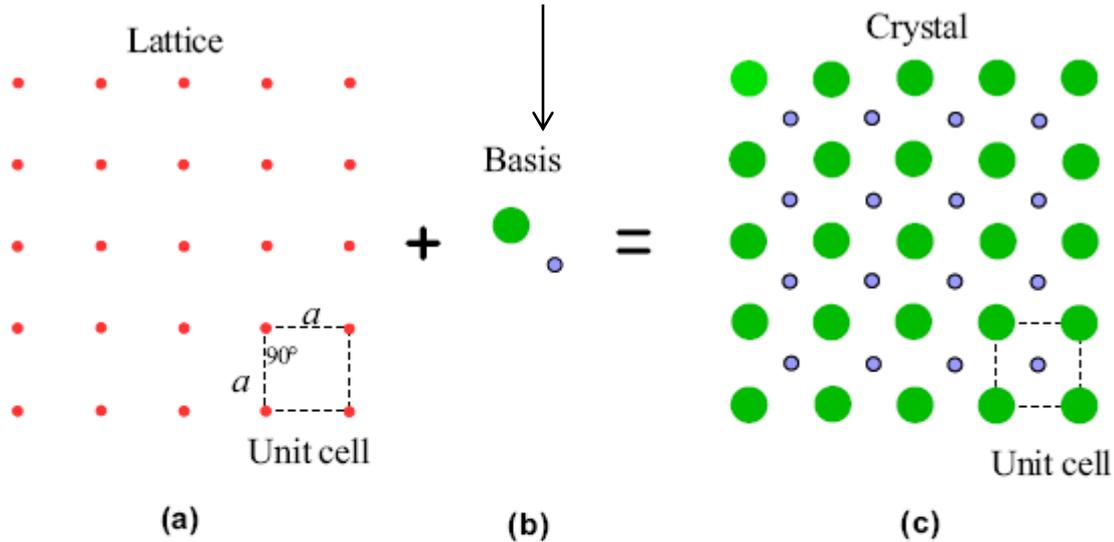
Segue então a seguinte relação que o volume da célula vezes a densidade de pontos (n) tem como resultado 1:

$$V_{cel}n = 1$$

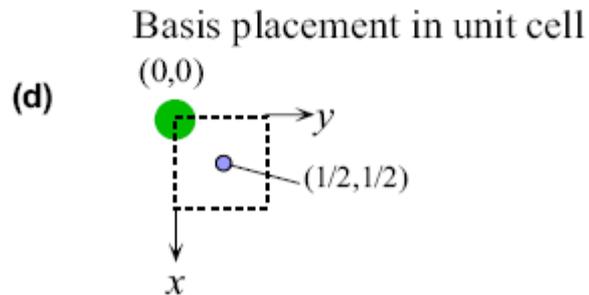
Observação: como a densidade de pontos não muda, o volume da célula Primitiva é sempre o mesmo independente da escolha.

ESTRUTURA CRISTALINA: Rede+Base

Base é o arranjo dos átomos dentro da célula primitiva



Importante:
PONTOS DA
REDE \neq ÁTOMOS



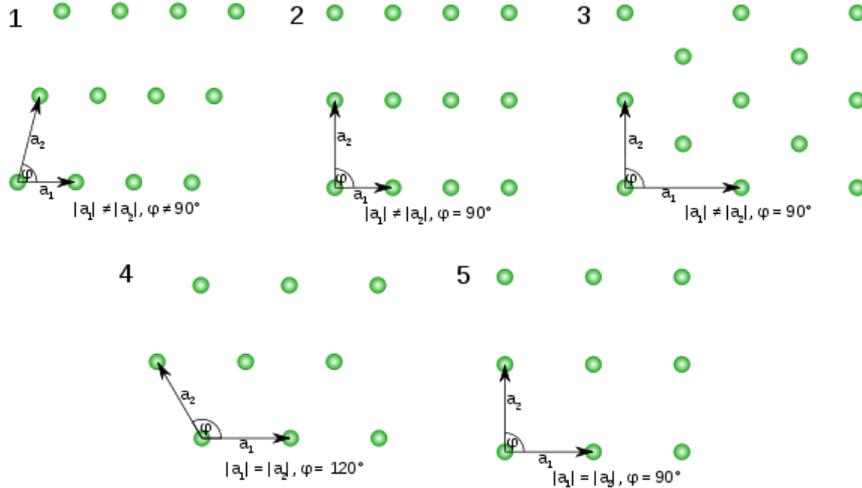
Estrutura do cristal: cópias idênticas da base em cada ponto da rede

Podemos então matematicamente estabelecer a simetria de translaçãõ

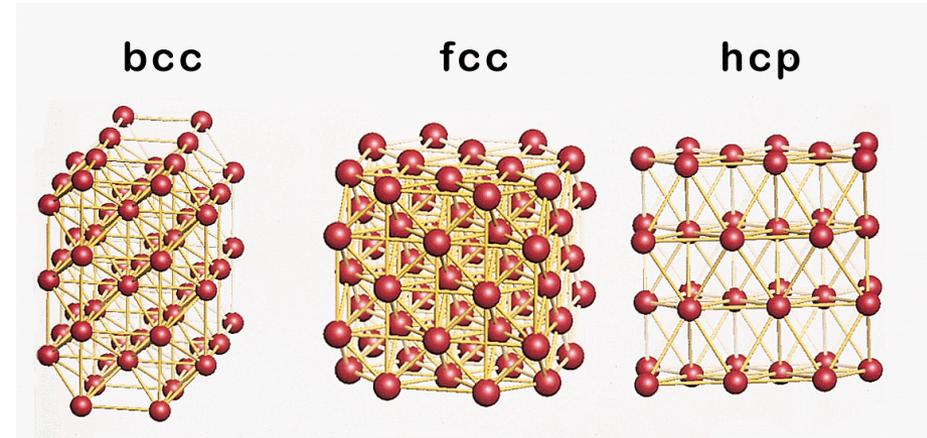
1D



2D



3D



Representação destas simetrias

\vec{R}

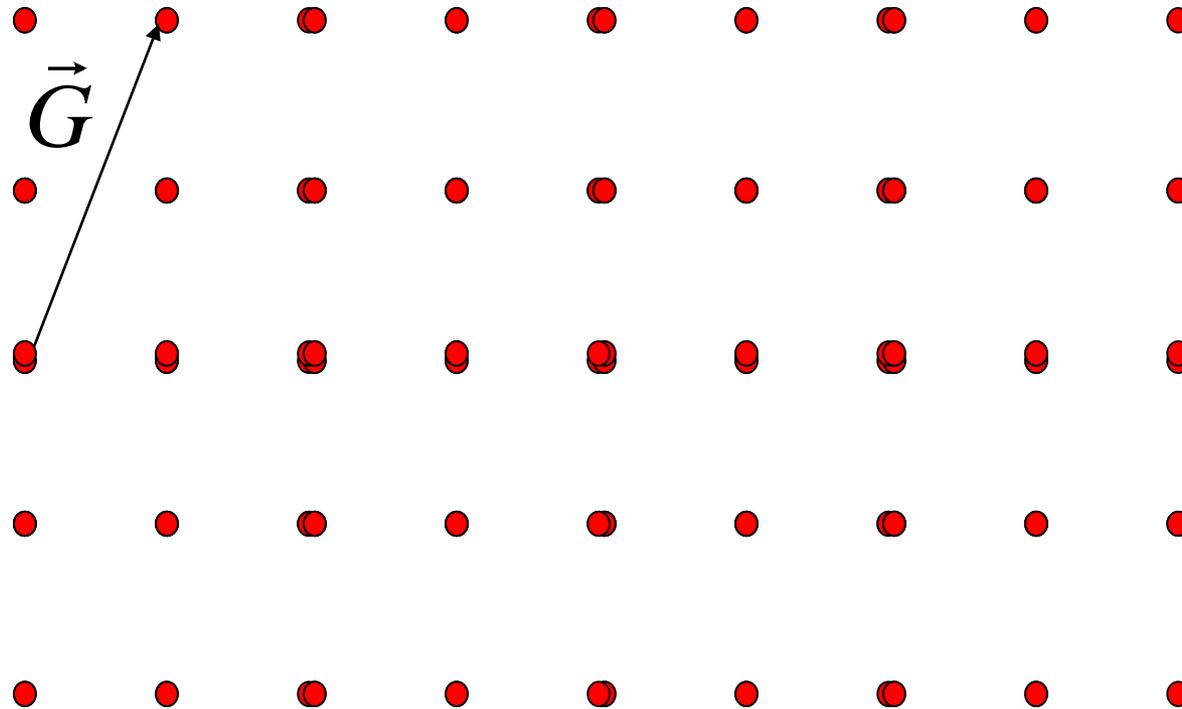
Precisamos criar um mundo paralelo



Vetor \vec{G} : define a rede de Bravais no **espaço recíproco**, é o "irmão" do vetor \vec{R}

$$\vec{G} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 + m_3 \vec{b}_3$$

Números inteiros



Construímos G tal que:

$$e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} = e^{i\vec{G} \cdot (\vec{r} + \vec{R})}$$

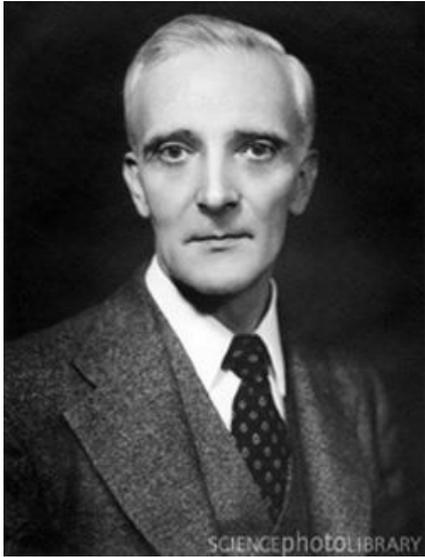
(Função é periódica)

$$e^{i\vec{G} \cdot \vec{R}} = 1$$

E pra isso:

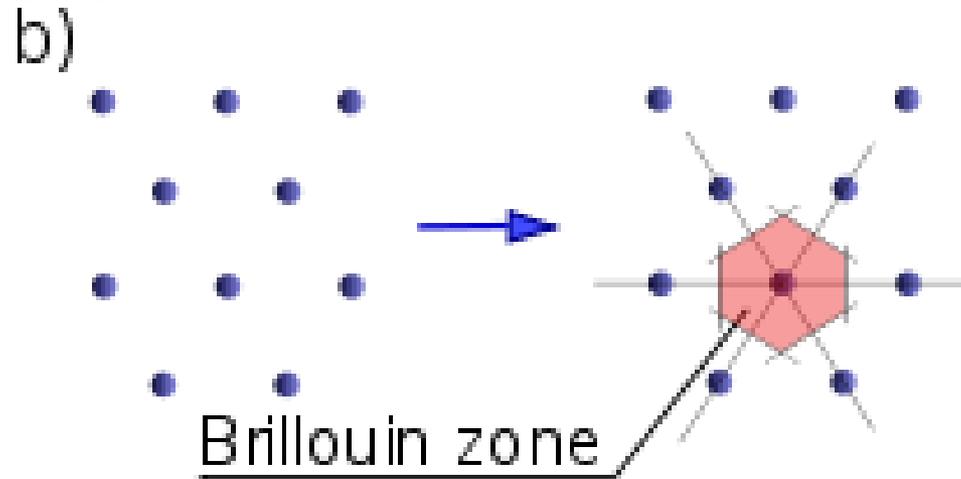
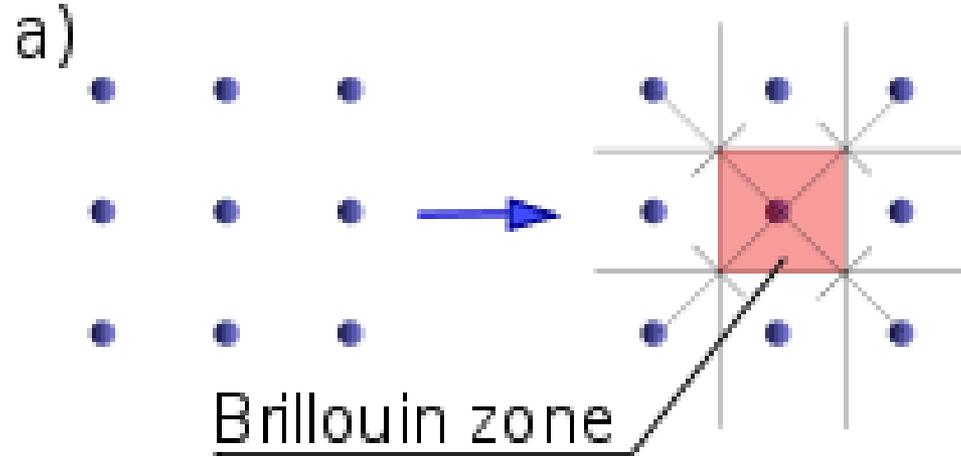
$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

A célula primitiva no espaço recíproco seguindo a metodologia de Wigner é chamada de Primeira Zona de Brillouin



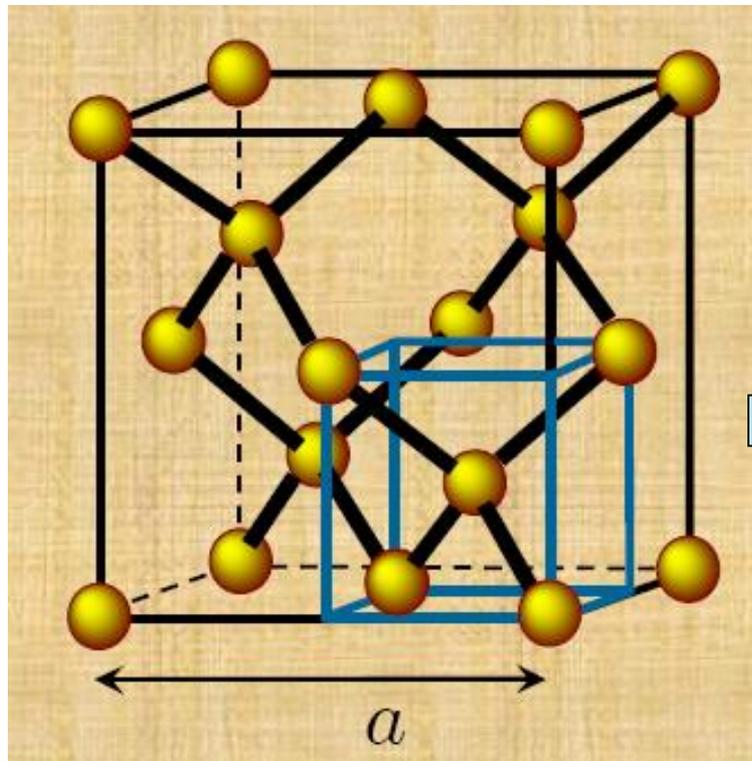
Léon Nicolas Brillouin (1889-1969)

http://serc.carleton.edu/NAGTWorkshops/mineralogy/mineral_physics/brillouin.html

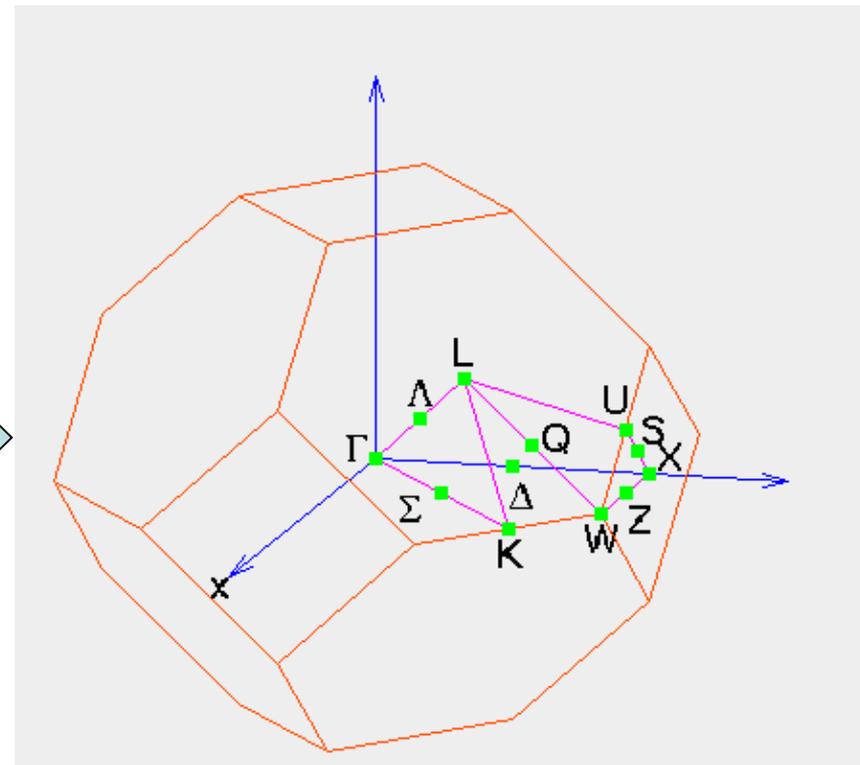


Mais diretamente para enfatizar:

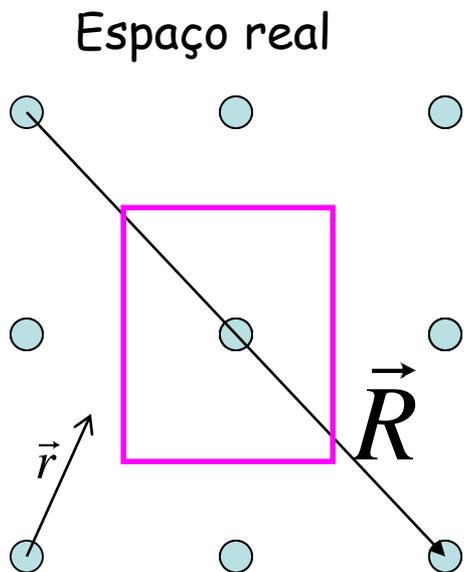
Si: rede fcc



1 zona de Brillouin

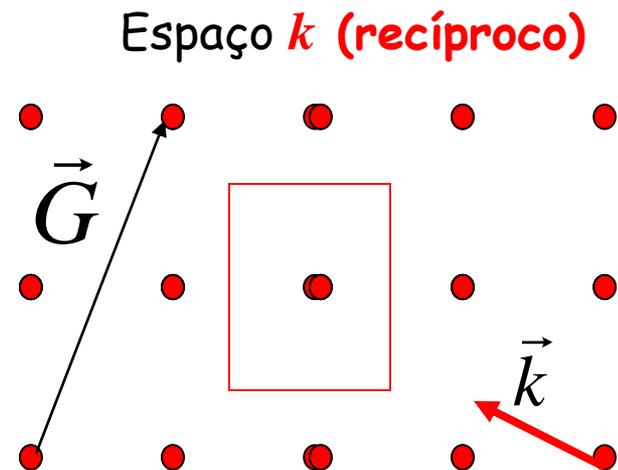


Resumindo:



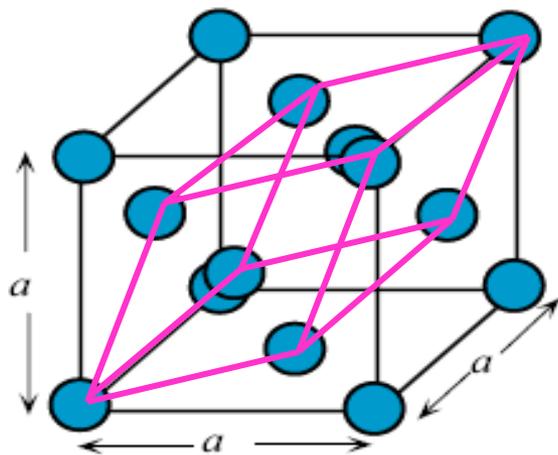
$$e^{i\vec{G}\cdot\vec{R}} = 1$$

$$\vec{R}\cdot\vec{G} = 2\pi m$$



Em 3D

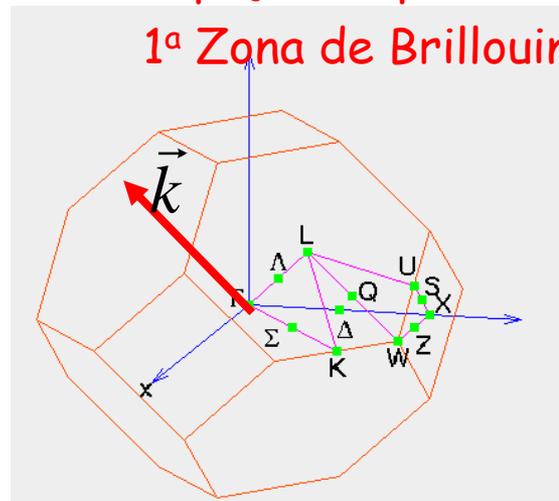
Célula primitiva



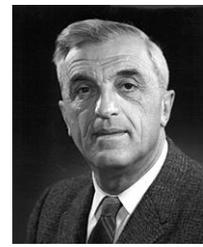
(c)



Célula primitiva no
espaço recíproco:
1ª Zona de Brillouin



Teorema de Bloch



Se o potencial é **periódico**

$$V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r})$$

Multiplicada por
uma onda plana

A função e onda será:

$$\psi \rightarrow \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

sendo

$$u_{n\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$$

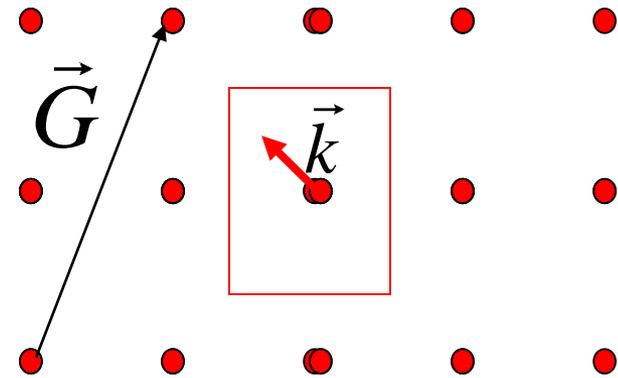
Temos a função de Bloch

O que significa este vetor k ?

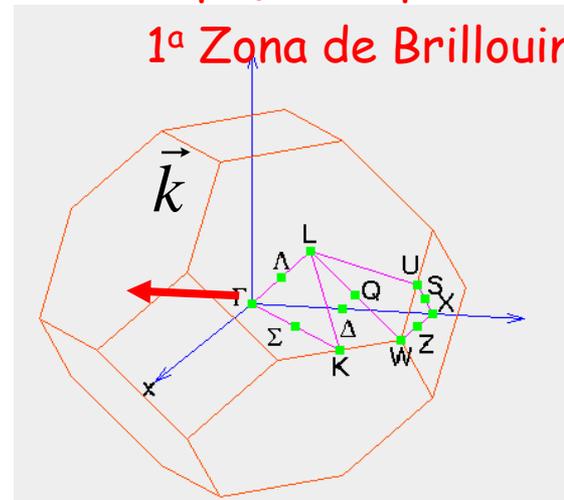
$$\psi \rightarrow \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \mathbf{u}_{n\vec{k}}(\vec{r})$$

Ok, sabemos o formato, mas como resolvemos?

Espaço k (recíproco)



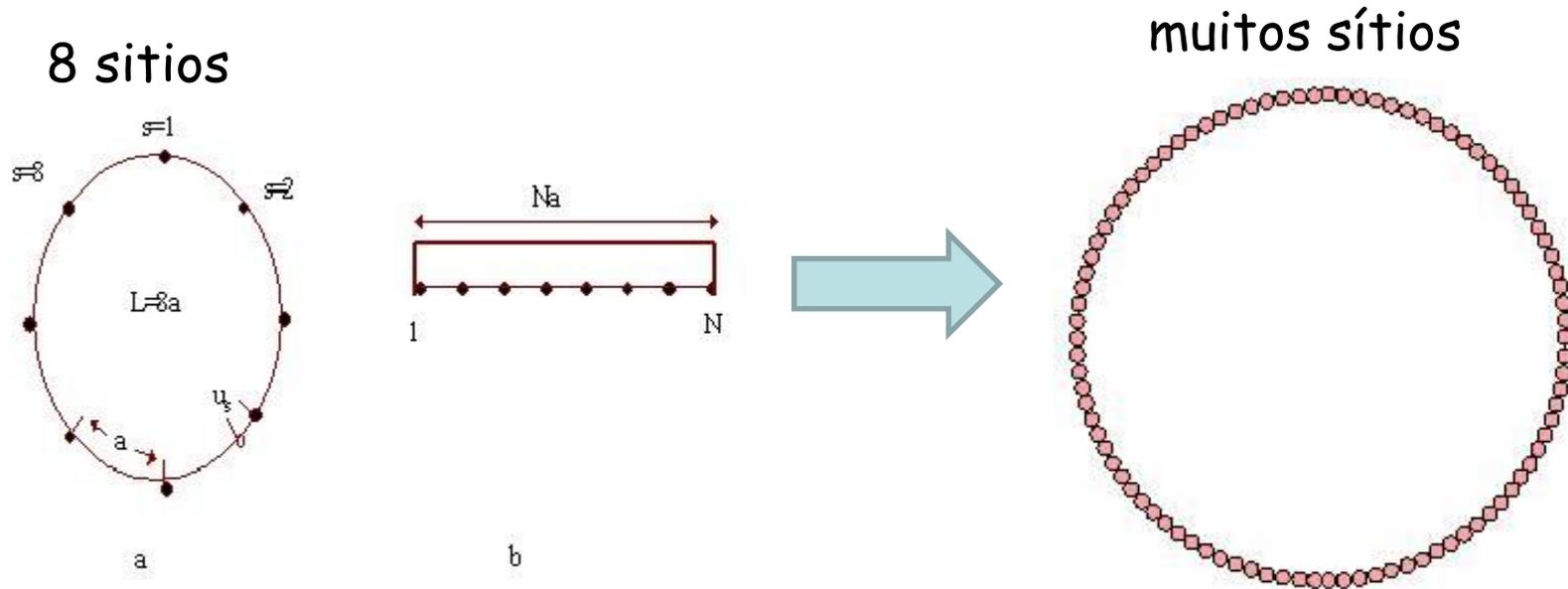
Célula primitiva no espaço recíproco:
1ª Zona de Brillouin



Condições de contorno de Born-Von Karman (periódicas):

1) Assumimos que nosso Sistema é muito, muito longo e efeitos de superfície são desprezados

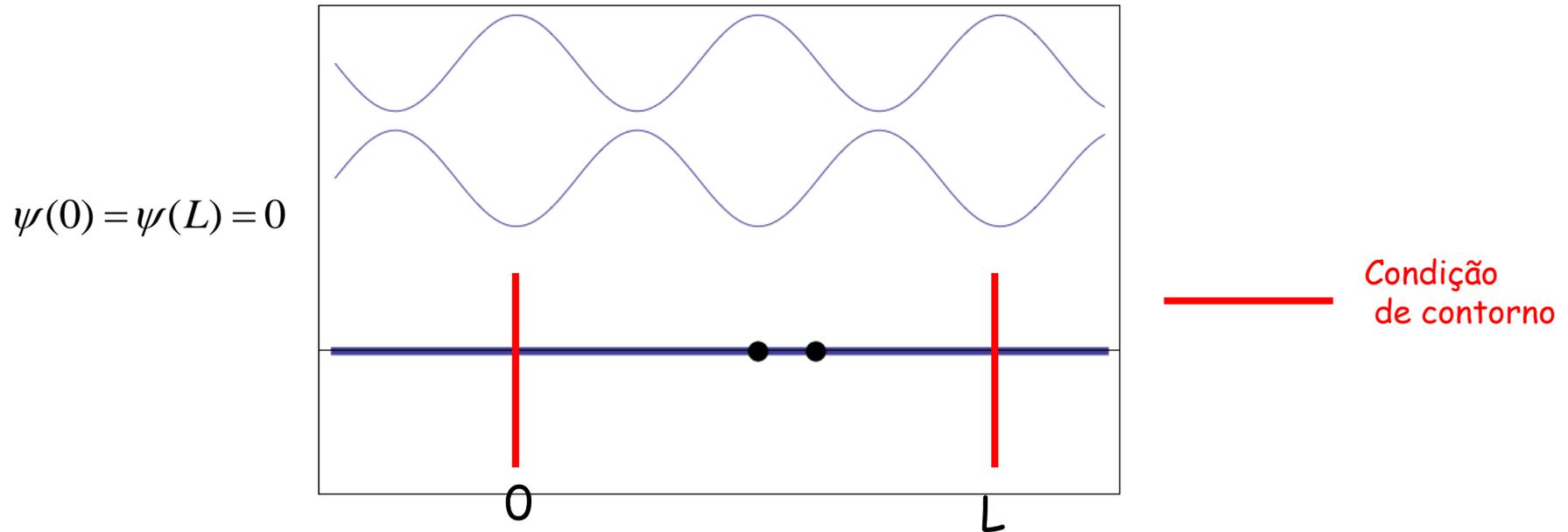
2) Uma forma interessante de fazer isso é unir as pontas:



<http://memim.com/born-von-karman-boundary-condition.html>

Obs. Jogamos fora possíveis anomalias que existem no fim do cristal 1D

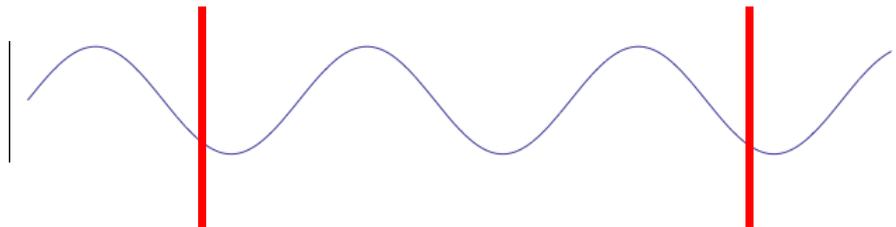
3) No entanto, se assumirmos que a função de onda é nula nas extremidades, por exemplo, necessariamente teríamos que lidar com a soma de ondas e com reflexões



Já quando assumimos c. c. periódicas, conseguimos descrever ondas propagantes apenas

<http://www.acs.psu.edu/drussell/Demos/superposition/superposition.html>

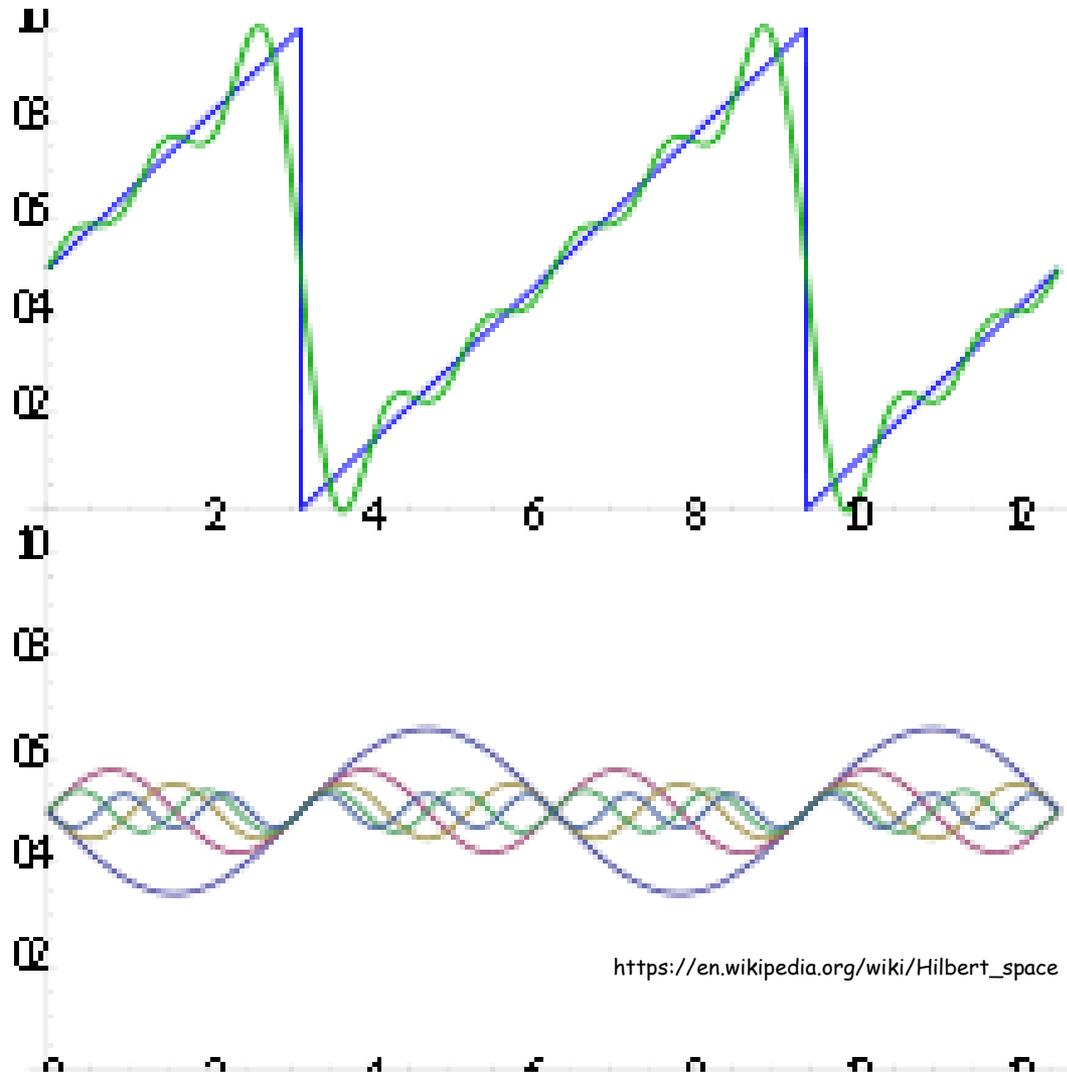
$\psi(0) = \psi(L)$



Neste contexto, vamos tentar resolver a equação de Schroedinger com uma expansão em ondas planas



Exemplo de descrição de uma função via ondas planas:



Supondo esta expansão....

Nos transformamos a equação de Schroedinger:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} c_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad \Downarrow \quad U(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} u_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}$$

$\vec{q} = \vec{k} - \vec{G}$

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G})^2 - E) c_{\vec{k} - \vec{G}} + \sum_{\vec{G}''} u_{\vec{G}'' - \vec{G}} c_{\vec{k} - \vec{G}''} = 0$$

(equação de Schroedinger no espaço recíproco)

Equação de Schroedinger no cristal

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G})^2 - E) c_{\vec{k}-\vec{G}} + \sum_{\vec{G}''} u_{\vec{G}''-\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}''} = 0$$

Se traduzira num problema matricial:

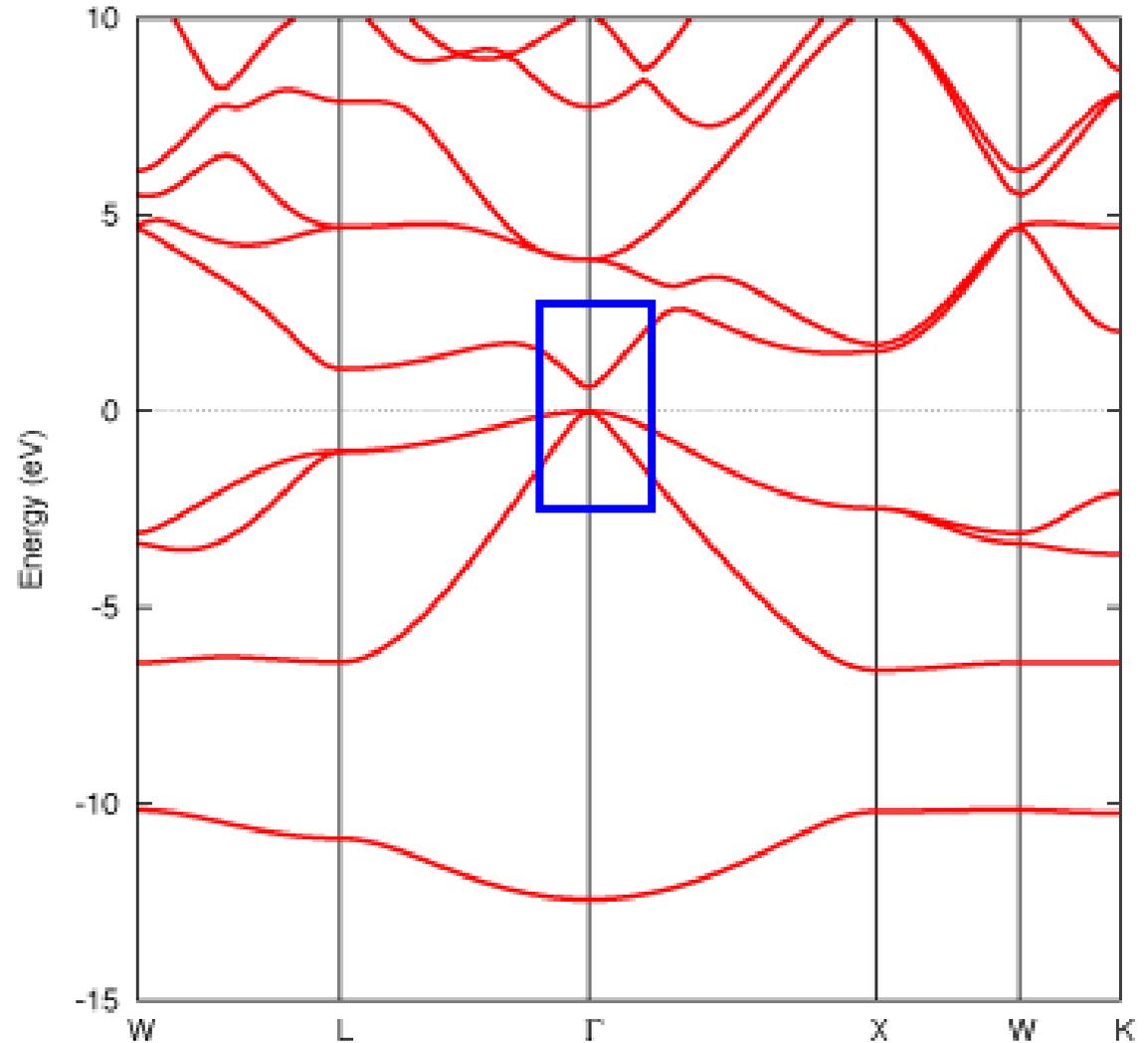
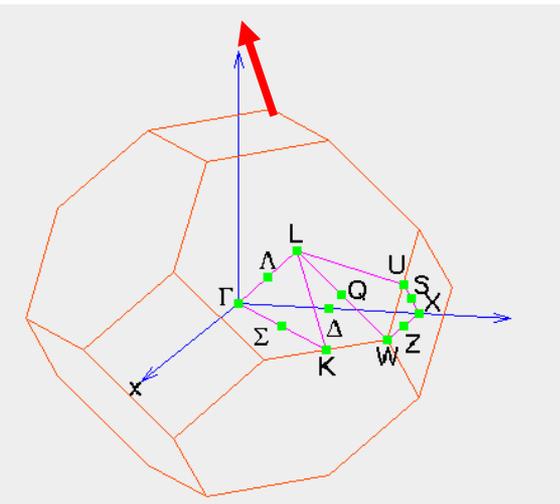
$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G}_1) - E & U_{\vec{G}_1-\vec{G}_2} & \dots & U_{\vec{G}_1-\vec{G}_N} \\ U_{\vec{G}_2-\vec{G}_1} & \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G}_2) - E & \dots & U_{\vec{G}_2-\vec{G}_N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ U_{\vec{G}_N-\vec{G}_1} & U_{\vec{G}_N-\vec{G}_2} & \dots & \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G}_N) - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\vec{k}-\vec{G}_1} \\ c_{\vec{k}-\vec{G}_2} \\ \vdots \\ c_{\vec{k}-\vec{G}_N} \end{pmatrix} = 0$$

E_{nk}

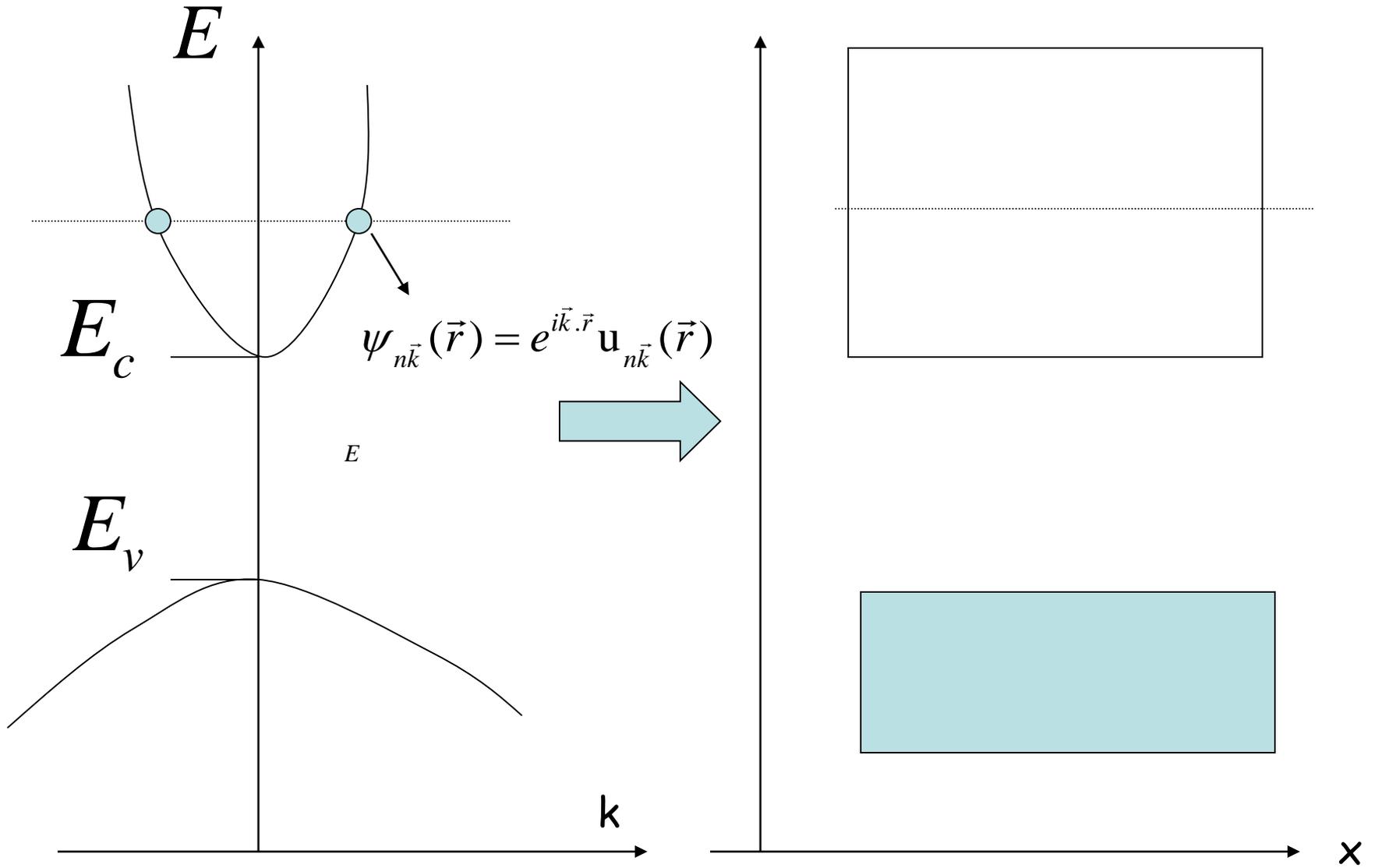
$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}} e^{i(\vec{k}-\vec{G}) \cdot \vec{r}}$$

Soluções para energia em função de k : Estrutura de Bandas

$$E_{nk}$$



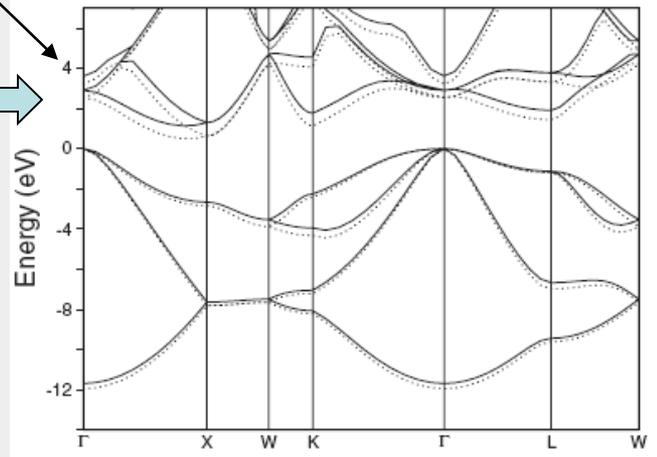
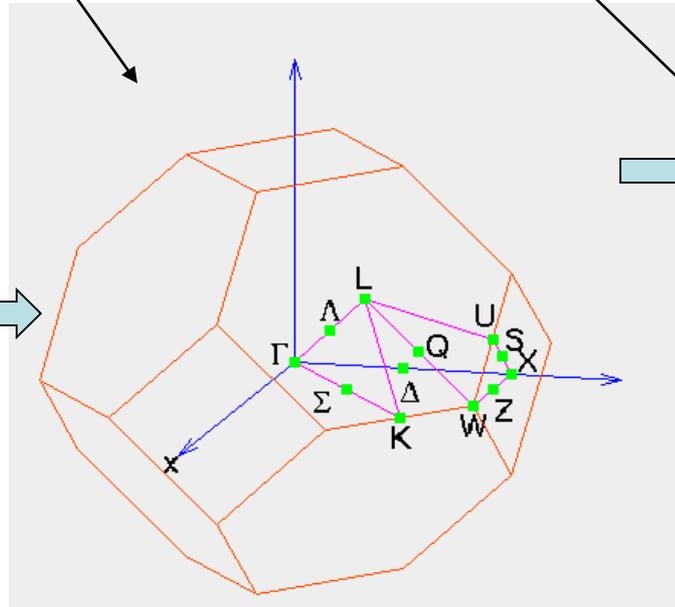
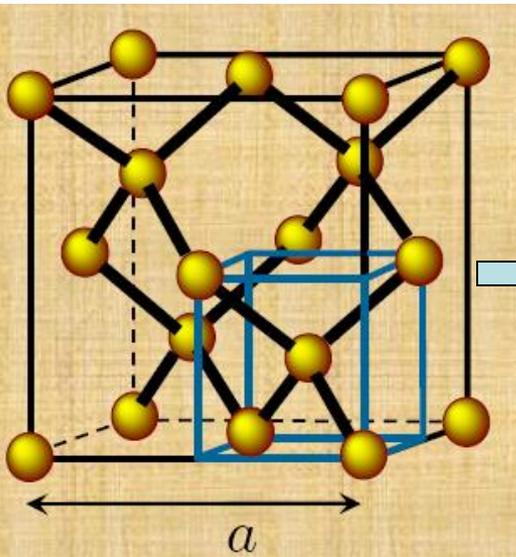
Outra forma de representar a banda



A lógica será:

(Equação de Schroedinger no cristal)

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G})^2 - E)c_{\vec{k}-\vec{G}} + \sum_{\vec{G}''} u_{\vec{G}''-\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}''} = 0$$



Na pratica o que fazemos é a diagonalização da matriz

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k} - \vec{G}_1) & U_{\vec{G}_1 - \vec{G}_2} & \cdots & U_{\vec{G}_1 - \vec{G}_N} \\ U_{\vec{G}_2 - \vec{G}_1} & \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k} - \vec{G}_2) & \cdots & U_{\vec{G}_2 - \vec{G}_N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ U_{\vec{G}_N - \vec{G}_1} & U_{\vec{G}_N - \vec{G}_2} & \cdots & \frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k} - \vec{G}_N) \end{pmatrix}$$

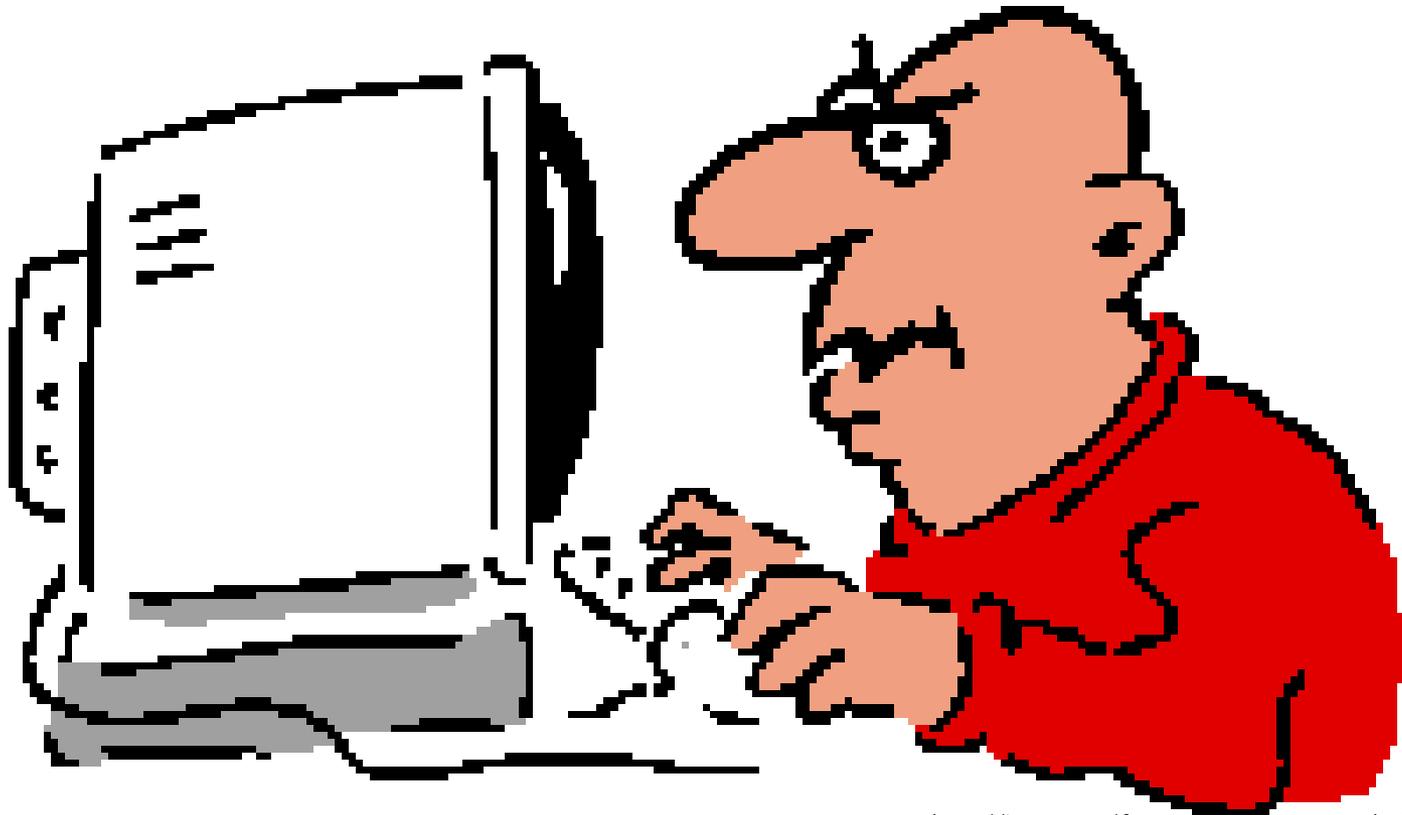
Ou seja, achar P, tal que

$$P^{-1}FP = D = \begin{pmatrix} f_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & f_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & f_N \end{pmatrix} \quad \begin{array}{l} \text{Autovalores serão} \\ \text{os elementos diagonais} \end{array}$$

E os autoestados serão:

$$P = (\psi_1 \quad \psi_2 \quad \cdots \quad \psi_N)$$

É muito claro que esse trabalho é para o computador.....



<http://becuo.com/funny-computer-animated-gif>

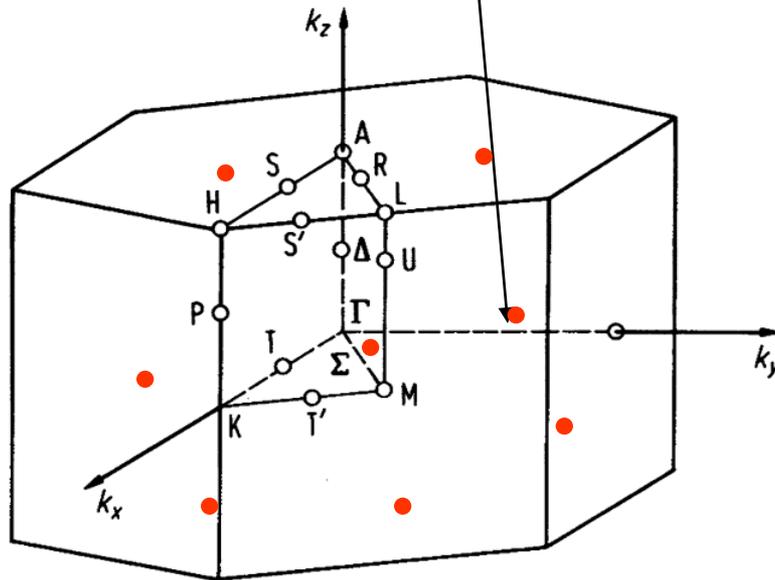
O entendimento da física de sólidos foi muito ajudada com o advento de computadores

calculo autoconsistente

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{k} - \vec{G}) - E\right)c_{\vec{k}-\vec{G}} + \sum_{\vec{G}''} u_{\vec{G}''-\vec{G}} c_{\vec{k}-\vec{G}''} = 0$$

Primeira Zona de Brillouin:

$$\rho = \frac{\Omega}{N_{\text{ptos}-k}} \sum_{nk} \rho_n(\vec{k}) \longrightarrow \rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \rho_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}$$



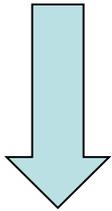
$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} u_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}$$

Com este grid de pontos ks, calculamos:

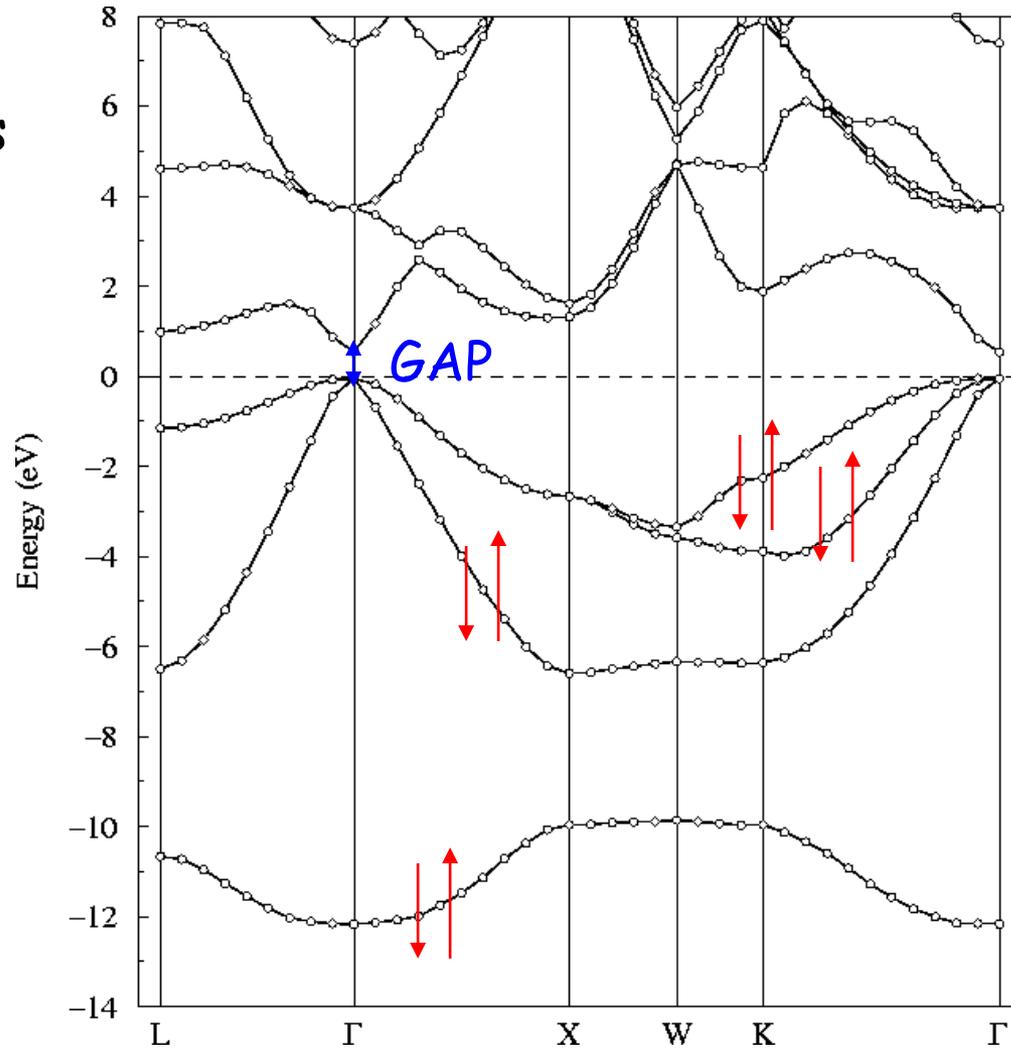
- (i) Energia total
- (ii) Densidade de carga
- (iii) Constante de rede
- (iv) Comprimentos de ligação
- (v) etc

Exemplo real: Estrutura de bandas do GaAs

2 átomos por célula
Primitiva: 8 elétrons
de valência (3 do Ga
e 5 do As)



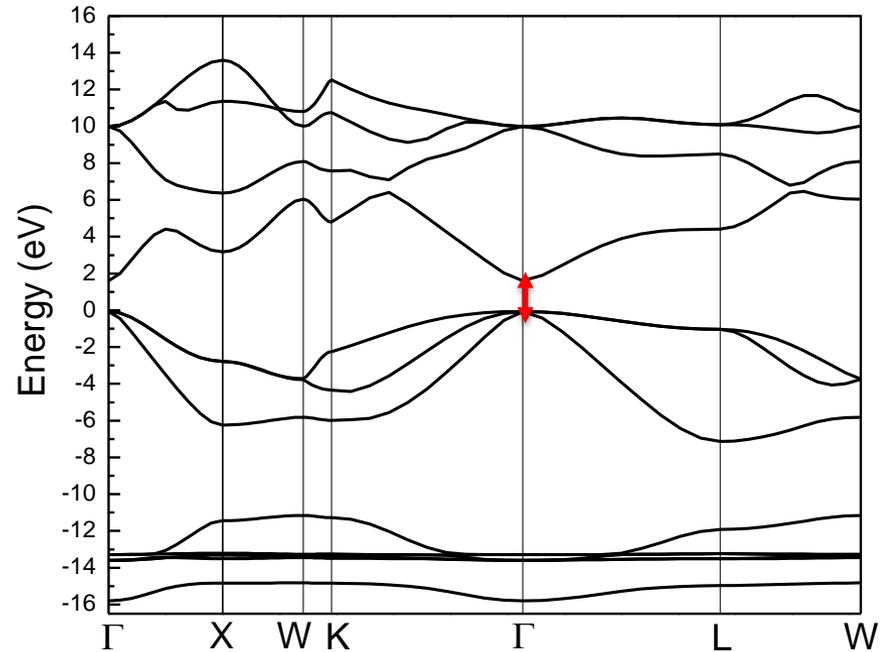
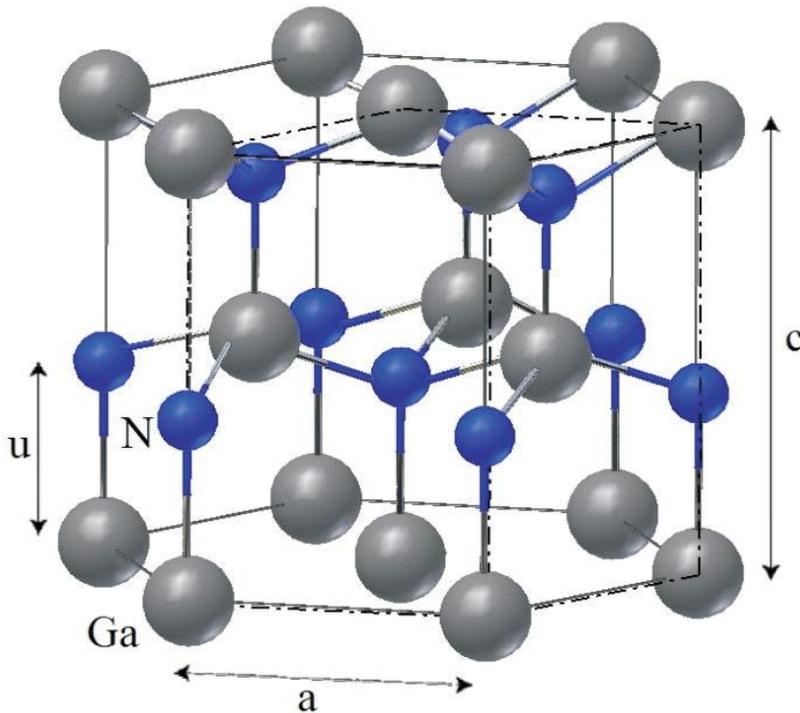
Quatro bandas
totalmente
Preenchidas :
semicondutor



Análogo ao q (só que em 3D q é vetor)

"O problema de gap na DFT"

Embora este "esquema" calcule de maneira muito boa as propriedades do estado fundamental, para propriedades eletrônicas fundamentais como *gap*, *ele dá resultados significativamente menores que a experiência...* Exemplo: GaN



https://www.researchgate.net/figure/257973499_fig6_Wurtzite-structure-and-unit-cell-dashed-lines-for-GaN

"a", e "c", erro ~ 1%

Gap calculado: ~2 eV
Gap experimental: ~3,4 eV

Ok, mas como calcular gaps ???

Pode-se dizer que ainda é um grande desafio teórico e prático !



Existem vários métodos: *GW*, *SIC*, Funcionais Híbridos ,Exact Exchange, LDA + U, etc.



Mas bons resultados só são obtidos com métodos **extremamente custosos**, o que restringe a aplicação a sistemas simples

Observação:

A estrutura de bandas (EB) de um semicondutor é essencial para determinar sua utilidade potencial.

Consequentemente, o conhecimento preciso da EB é crítica para que o semicondutor seja incorporado para a lista de materiais de uma dada aplicação



THE LDA-1/2 METHOD

PHYSICAL REVIEW B **78**, 125116 (2008)



Approximation to density functional theory for the calculation of band gaps of semiconductors

Luiz G. Ferreira*

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 66318, 05315-970 São Paulo, São Paulo, Brazil

Marcelo Marques[†] and Lara K. Teles[‡]

Instituto Tecnológico de Aeronáutica, 12228-900 São José dos Campos, São Paulo, Brazil

AIP ADVANCES **1**, 032119 (2011)

Slater half-occupation technique revisited: the LDA-1/2 and GGA-1/2 approaches for atomic ionization energies and band gaps in semiconductors

Luiz G. Ferreira,^{1,2,a} Marcelo Marques,² and Lara K. Teles²

¹*Instituto de Física, Universidade de São Paulo, CP 66318, 05315-970 São Paulo, SP, Brazil*

²*Instituto Tecnológico de Aeronáutica, 12228-900 São José dos Campos, SP, Brazil*



Além disso, considerando o tempo computacional de um cálculo em que

GW
dias

Hybrid
(HSE)
Horas

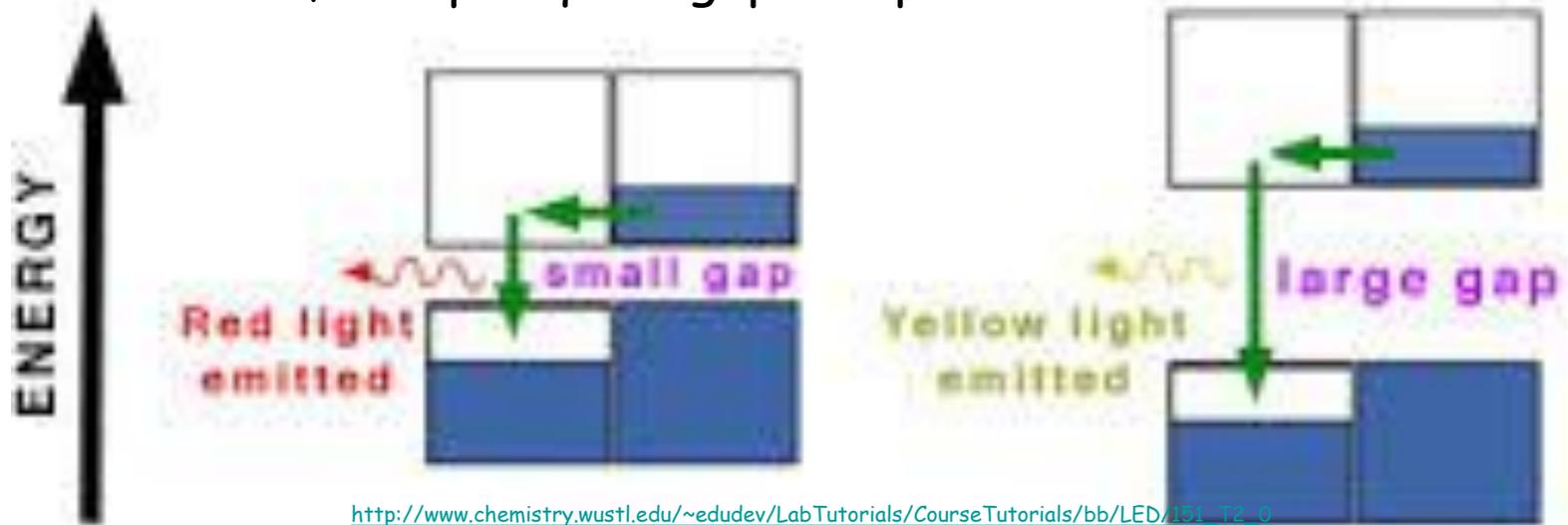
A mesma
memória !

LDA
segundos
minutos

LDA-1/2
segundos
minutos

Podemos utilizar o método LDA -1/2 para o estudo de sistemas mais complexos !

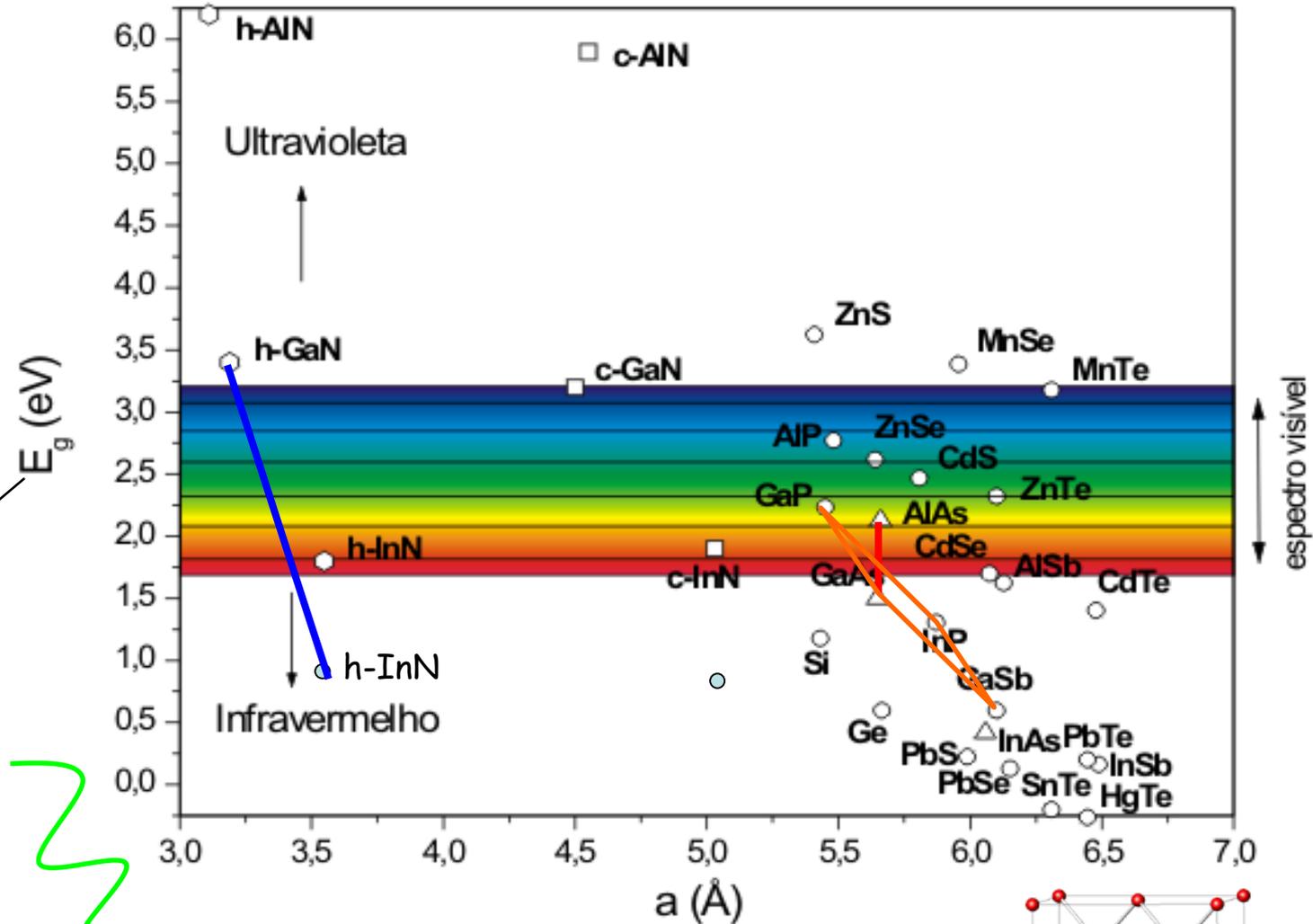
Poxa, mas por que o gap e importante ?



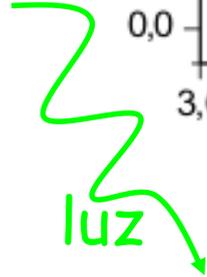
http://www.chemistry.wustl.edu/~edudev/LabTutorials/CourseTutorials/bb/LED/LED_L2_07_LED.pdf



Apesar de todas as ideias geniais só existe white LEDs pois existem materiais que emitem luz no azul

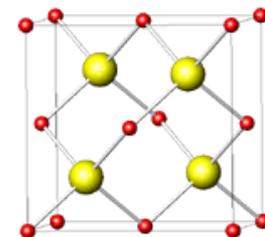


E_g



a (Å)

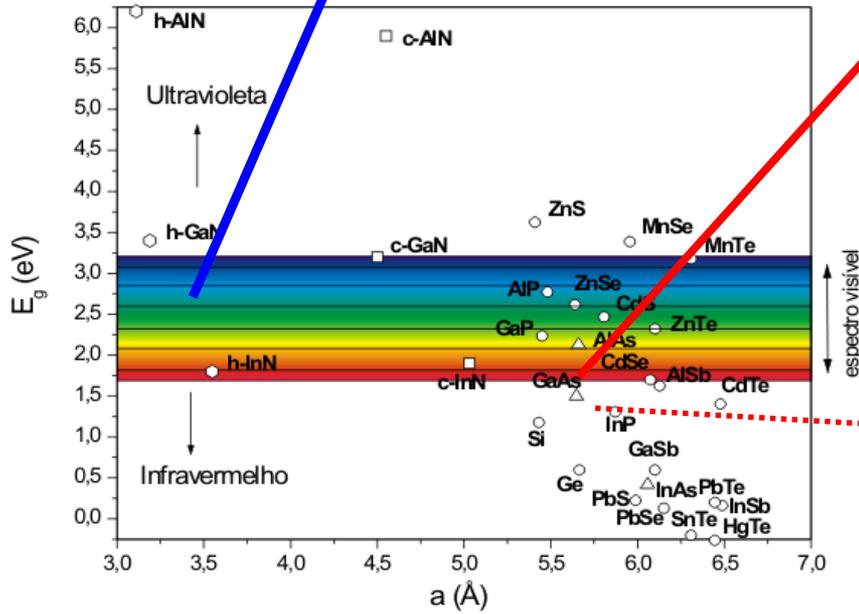
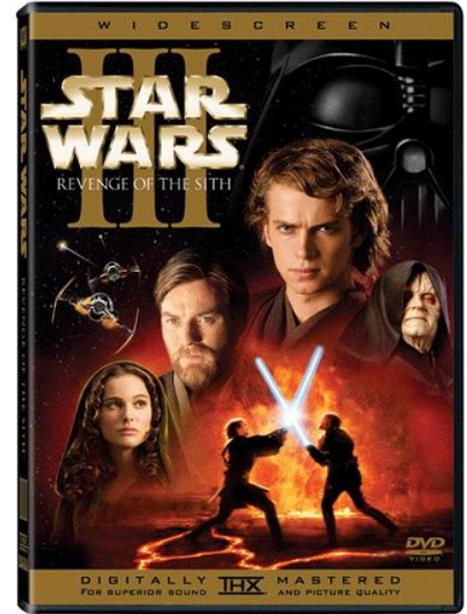
Distância entre átomos



Blue ray-DVD



DVD

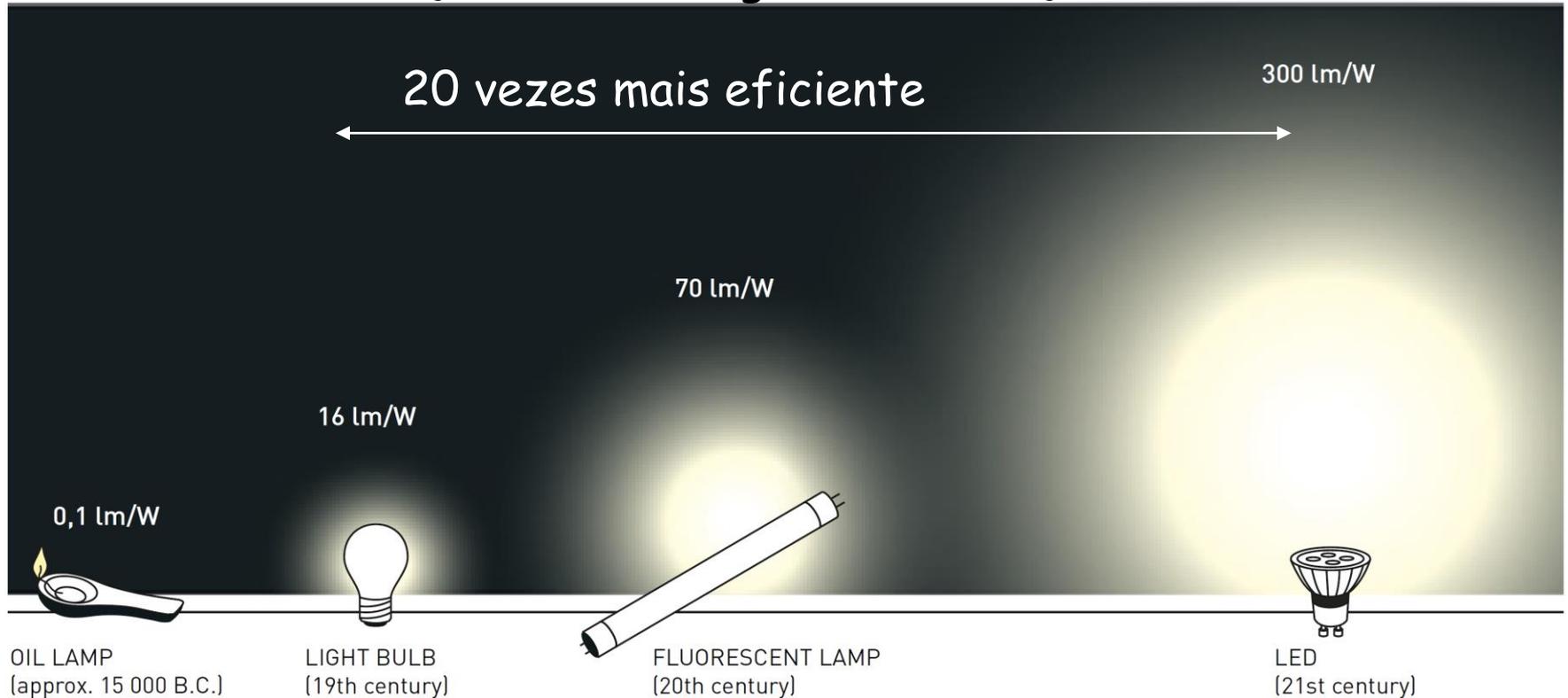


CD



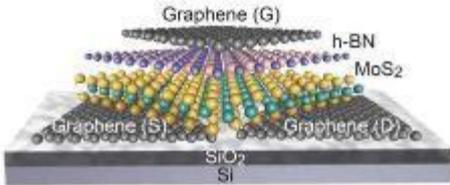
Um problema simples: iluminação

Evolução da tecnologia de iluminação



LED lamps require less power to emit light than the older light sources. Efficiency is denoted in luminous flux (measured in lumen) per unit added power (measured in watt). As about one fourth of world electricity consumption is used for lighting purposes, the highly energy-efficient LED lamps contribute to saving the Earth's resources.

1) Simulação Quântica de Materiais será cada vez mais importante



<http://newscenter.lbl.gov/2014/06/03/2d-transistors-promise-a-faster-electronics-future/>

Computação: Simulações cada vez mais complexas



<http://odia-a-historia.blogspot.com.br/2016/07/transistor.html>

Nanotecnologia: Dispositivos cada vez menores

tamanho

2) Simulação Quântica de Materiais já virou atividade industrial Laboratórios

- ⚙ **IBM** : Yorktown Heights, San José, Rüschlikon (Suíça)
- ⚙ **Bell Laboratories (AT&T)** em Murray Hills
- ⚙ **Palo Alto Research Center -XEROX**
- ⚙ **NEC Laboratories** em Tsukuba (Japão)
- ⚙ etc.

Fonte: E. Wimmer, J. Phys. Condens. Matter 20 064243 (2008)

Linhas de pesquisa



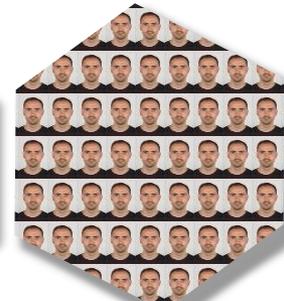
Lara K. Teles



Marcelo Marques



Ivan Guilhon



André Chaves



Gabriela Nascimento



Fernando Valadares



Leticia Agra



C. Ataíde pos-doc



Gabriel de Paula



Vinícius Gomes



Felipe Martins



Bruno Lucatto



F. Matusalém pos-doc



D. Guedes pos-doc

Linhas de Pesquisa



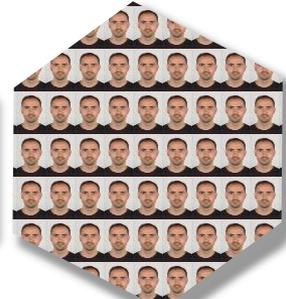
Lara K. Teles



Marcelo Marques



Ivan Guilhon



André Chaves

Perovskitas
2D



Fernando Valadares



Leticia Agra



C. Ataíde pos-doc



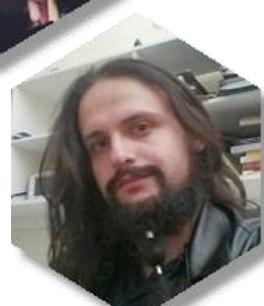
Gabriel de Paula



Vinícius Gomes



Felipe Martins



Bruno Lucatto



F. Matusalém pos-doc



D. Guedes pos-doc

Linhas de Pesquisa



Lara K. Teles



Marcelo Marques



Ivan Guilhon



André Chaves

Ligas
3D

Perovskitas
2D



Leticia Agra



C. Ataíde pos-doc



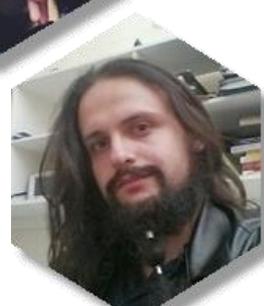
Gabriel de Paula



Vinícius Gomes



Felipe Martins



Bruno Lucatto



F. Matusalém pos-doc



D. Guedes pos-doc

Linhas de Pesquisa



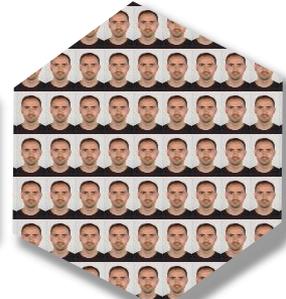
Lara K. Teles



Marcelo Marques



Ivan Guilhon



André Chaves

Ligas
3D

Perovskitas
2D



Propriedades
Mecânicas @2D



C. Ataíde
pos-doc



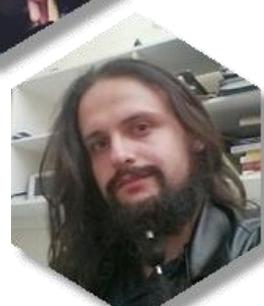
Gabriel de Paula



Vinícius Gomes



Felipe Martins



Bruno Lucatto



F. Matusalém
pos-doc



D. Guedes
pos-doc

Linhas de Pesquisa



Lara K. Teles



Marcelo Marques



Ivan Guilhon



André Chaves

Ligas
3D

Perovskitas
2D



Propriedades
Mecânicas @2D



C. Ataíde
pos-doc



Ligas dumbbell



Vinícius Gomes



Felipe Martins



Bruno Lucatto



F. Matusalém
pos-doc



D. Guedes
pos-doc

Linhas de Pesquisa



Lara K. Teles



Marcelo Marques



Ivan Guilhon



André Chaves

Ligas
3D

Perovskitas
2D



Propriedades
Mecânicas @2D



C. Ataíde
pos-doc



Ligas dumbbell



óxidos



Felipe Martins



Bruno Lucatto



F. Matusalém
pos-doc



D. Guedes
pos-doc

Linhas de Pesquisa



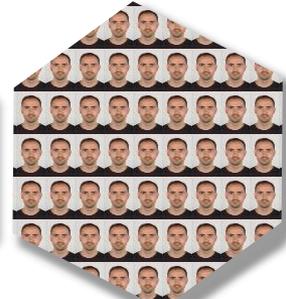
Lara K. Teles



Marcelo Marques



Ivan Guilhon



André Chaves

Ligas
3D

Perovskitas
2D



Propriedades
Mecânicas @2D



C. Ataíde
pos-doc



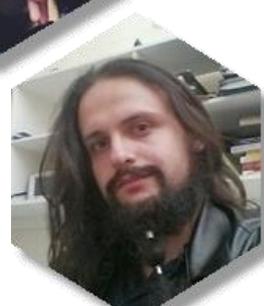
Ligas dumbbell



óxidos



Moléc.@2D



Bruno Lucatto



F. Matusalém
pos-doc



D. Guedes
pos-doc

Linhas de Pesquisa



Lara K. Teles



Marcelo Marques



Ivan Guilhon



André Chaves

Ligas
3D

Perovskitas
2D



Propriedades
Mecânicas @2D



C. Ataíde
pos-doc



Ligas dumbbell



óxidos



Moléc.@2D



Qubit



F. Matusalém
pos-doc



D. Guedes
pos-doc

Linhas de Pesquisa



Lara K. Teles



Marcelo Marques



Ivan Guilhon



André Chaves

Ligas
3D

Perovskitas
2D



Propriedades
Mecânicas @2D



C. Ataíde
pos-doc



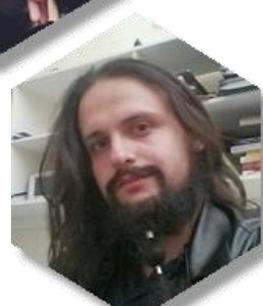
Ligas dumbbell



óxidos



Moléc.@2D



Qubit



Isolantes
topológicos@2D



D. Guedes
pos-doc

Linhas de Pesquisa



Lara K. Teles



Marcelo Marques



Ivan Guilhon



André Chaves

Ligas
3D

Perovskitas
2D



Propriedades
Mecânicas @2D



óxidos



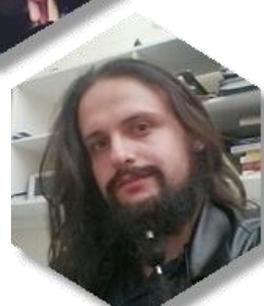
Ligas dumbbell



óxidos



Moléc.@2D



Qubit



Isolantes
topológicos@2D



D. Guedes
pos-doc

Linhas de Pesquisa



Lara K. Teles



Marcelo Marques



Ivan Guilhon



André Chaves

Ligas
3D

Perovskitas
2D



Propriedades
Mecânicas @2D



óxidos



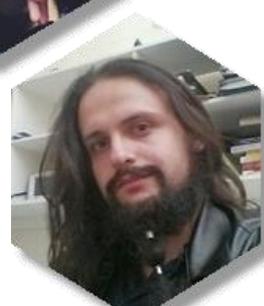
Ligas dumbbell



óxidos



Moléc.@2D



Qubit



Isolantes
topológicos@2D



Perovskitas 3D



Prêmios



Ronaldo R. Pelá (ELE-07)

- young best paper award (ICPS - Zurich)
- 2º lugar - III PRÊMIO MARECHAL-DO-AR CASIMIRO MONTENEGRO FILHO - tese de doutorado



B. Lucatto (ELE-16')

- melhor IC nacional

Ivan Guilhon (ELE-14)

- melhor TG (2014) - curso eletrônica do ITA
- melhor IC do ITA (2013)

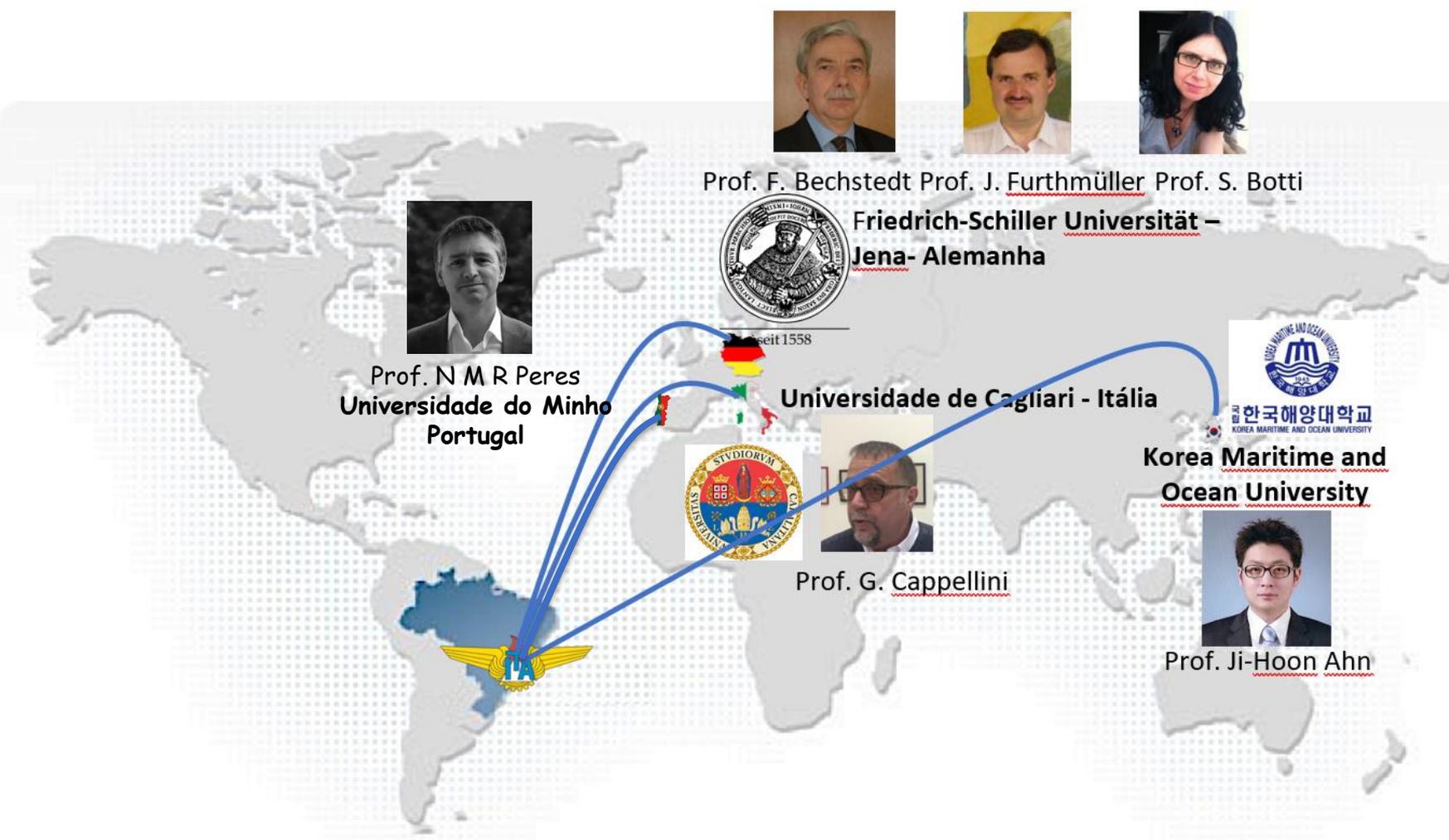


D. S. Koda (ELE-17)

- best young poster Hong-Kong
- melhor IC nacional



Cooperação Internacional



Prof. F. Bechstedt Prof. J. Furthmüller Prof. S. Botti



Friedrich-Schiller Universität – Jena- Alemanha

seit 1558



Prof. N M R Peres
Universidade do Minho Portugal



Università di Cagliari - Itália



Prof. G. Cappellini



한국해양대학교
KOREA MARITIME AND OCEAN UNIVERSITY

Korea Maritime and Ocean University



Prof. Ji-Hoon Ahn

Colaborações Nacionais

USP



Lucy V. C. Assali


MackGraphe



Cecília de C. C. Silva


UFRRJ



Antônio M. da Silva Jr.

·UEMS·

Universidade Estadual
de Mato Grosso do Sul



Adriano M dos Santos


UFC



Gil de Aquino Farias

Iniciação Científica

- Anualmente
 - 4 bolsas PIBIC
 - Possibilidade de bolsa FAPESP, após um período de trabalho
- Reuniões semanais
- Tempo de dedicação
 - Dedicação ao projeto de pesquisa em ritmo compatível com o curso durante o ano letivo e de forma intensificada durante as férias.

Matérias Extra Curriculares

- FF-253: Introdução à Mecânica Quântica
 - 1o semestre
- FF-281: Física do Estado Sólido
 - 1o semestre
 - Semicondutores
- Minicursos ministrados por professores visitantes

Oportunidades

- Realizar pesquisa de ponta
- Publicar artigos científicos
- Apresentar trabalhos em congressos nacionais e internacionais
- Participar de cursos de verão/inverno
- TG
- Mestrado junto com graduação (a partir do 4º ano)
- Doutorado direto
- Interação com professores estrangeiros

Estamos procurando alunos motivados

Para trabalhar em:

- Materiais 2D:
 - Heteroestruturas e cristais fotônicos
- Materiais 2D/3D:
 - Isolantes topológicos
 - Perovskitas
 - Conexão DFT-TB
- e outros

Obrigado!

Contact us!

 gmsn@ita.br

 [@gmsn.ita](https://www.instagram.com/gmsn.ita)

