



**PROGRAMA DE DISCIPLINA**

**DISCIPLINA: Fundamentos da Teoria do Funcional de Densidade**

**MINISTRANTE:**

OBRIGATORIA	CRÉDITOS	SIGLA	CARGA HORÁRIA	ANO / SEMESTER
NÃO	4	F-DFT	60 h	

**EMENTA:**

1. Problema de muitos corpos e aproximação de Bohr-Oppenheimer. 2. Modelo de Thomas-Fermi - formulação e limitações. 3. Teoremas de Hohenberg e Kohn e equação de Kohn-Sham. 4. Funcionais locais e semilocais de troca-correlação: aproximação da densidade local (LDA) e gradiente generalizado (PW91, PBE, AM05, etc). 5. Conexão adiabática e funcionais híbridos: B3LYP, PBE0, HSE06, etc. 6. Correções para interação de van der Waals (Stefan Grimme, Taschenko-Scheffler) sistemas fortemente correlacionados (LDA+U). 7. Aproximação de pseudopotential: vantagens e limitações. 8. Implementações existentes para a teoria do funcional da densidade: ondas planas, funções atômicas localizadas, etc.

**BIBLIOGRAFIA:**

1. Koch, W.; Holthausen, M.C. A Chemist's Guide to Density Functional Theory, 2nd, Wiley-VCH, 2001.
2. Morgon, N.H.; Coutinho, K. (Eds.) Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular, Editora Livraria da Física, 2007.
3. Wilson, S. (Ed.) Handbook of Molecular Physics and Quantum Chemistry, Volume 2, John Wiley & Sons, 2003.
4. Grotendorst, J.; Blugel, S.; Marx, D. (Eds.) Computational Nanoscience: Do It Yourself, John von Neumann Institute for Computing, Julich, NIC Series, Vol. 31, ISBN 3-00-017350-1, pp. 45-70, 2006.
5. Sholl, D.; Steckel, J. A. Density Functional Theory: A Practical Introduction. Wiley-Interscience, 1 edition, 2009.
6. Kohanoff, J. Electronic Structure Calculations For Solids and Molecules: Theory and Computational Methods. Cambridge University Press, 2006.
7. Levine, I.N. Quantum Chemistry. 7.ed. Englewood Cliffs, Prentice Hall, 2013.
8. Giustino, F. Materials Modelling Using Density Functional Theory: Properties and Predictions. Oxford University Press, 2014.
9. Tsuneda, T. Density Functional Theory in Quantum Chemistry. Springer, 2014.