



Serviço Público Federal
Universidade Federal do Pará
Instituto de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica
Av. Augusto Correa, 01 – 66075 -110 – Belém – Pará - Brasil.
Telefone/fax: (0xx 91) 3201 – 7634 / e-mail: ppgee@ufpa.br

EMENTA

INSTITUTO: Instituto de Tecnologia / UFPA		DEPARTAMENTO: Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica - PPGEE		
CÓDIGO: PPGEE0246	NOME DA DISCIPLINA: TÓPICOS ESPECIAIS EM TELECOMUNICAÇÕES: TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE APLICADA AO ESTUDO DE NANOESTRUTURAS	TIPO: Optativa	CH 60	CR 04
ÁREA (S): Telecomunicações		LINHA (S) DE PESQUISA: Eletromagnetismo Aplicado		
Súmula: Pré-Requisitos: Eletromagnetismo Avançado, Física Moderna, Mecânica Quântica, Física do Estado Sólido, Métodos Computacionais e Programação em Linux I- Verificar as propriedades eletrônicas em novos alótropos de carbono 2-D análogos ao Grafeno através de testes de K-Grid e Meshcutoff propondo nanofitas utilizando esses materiais. II- Investigar as propriedades de transporte eletrônico molecular (via método híbrido DFT com funcional GGA/PBE e função de base polarizada duplamente polarizada, combinada a FGNE), implementadas via código computacional SIESTA, TranSIESTA e Quantum Espresso. III- Aplicações em propriedades eletrônicas (estrutura de estrutura de banda) e de transporte eletrônico: (i). curva corrente- tensão (I-V), (ii) curva condutância- tensão (G-V), (iii) curva de Espectroscopia de Voltagem de Transição – EVT (Modelo de Fowler-Nordheim - FN) e Modelo de Millikan-Lauritsen– ML, (iv) Densidade de estados (DOS) e (v) Densidade de estados projetada (PDos) via DFT/NEGF com os funcionais LDA e GGA utilizando os conjuntos de funções de base: SZ, SZP e DZP. IV- Sugerir a funcionalidade do dispositivo em relação aos fenômenos observados.				
Bibliografia: [1] P. Atkins, J. de Paula, R. Friedman, Quanta, Matéria e Mudança: Uma Abordagem Molecular Para a Físico-Química (Volume 1), ed. GenLtc, 2011. [2] J. C.Cuevas, E.Scheer, Molecular Electronics: An Introduction to Theory and Experiment. 2ª edition. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. (2010). [3] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin, Física do Estado Sólido, Ed. CENGAGE, 2011. [4] C. Kittel, Introdução à Física do Estado Sólido. Grupo Gen-LTC, 2000. [5] G. Keiser, Comunicações por Fibras Ópticas-4, Ed. AMGH, (2014). [6] E. C. Marino, Quantum Field Theory Approach to Condensed Matter Physics, ed. Cambridge University Press, 2017. [7] L. O. Nascimento, Introduction to Topological Phases and Electronic Interactions in (2+1) Dimensions, Brazilian Journal of Physics (impresso), 47, 2017. [8] H. Einollahzadeh, R.S. Dariani, S.M. Fazeli, Computing thebandstructureandenergygapofpenta-graphene byusingDFTand GOWO approximations, Solid StateCommunications, 229, 2016. [9] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim, The electronic				



Serviço Público Federal
Universidade Federal do Pará
Instituto de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica
Av. Augusto Correa, 01 – 66075 -110 – Belém – Pará - Brasil.
Telefone/fax: (0xx 91) 3201 – 7634 / e-mail: ppgee@ufpa.br

EMENTA

properties of graphene. Reviews of Modern Physics 81, 2009.

[10] J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, D. Sánchez-Portal, “The SIESTA Method for Ab Initio Order-N Materials Simulation”. Journal of Physics:Condensed Matter. 14, 2002.

[11] D.Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics. 2ª Edition. Benjamin: Cummings, 2004.

[12] Artigos relacionados disponível em <<http://jordan.ufpa.br/publicationsjdn.htm>> e referências atuais.

[13] Steven H. Simon, The Oxford Solid State Basics. First Edition published in 2013.

PROFESSOR (A):

Jordan Del Nero

Atualizada em: 01/02/2023