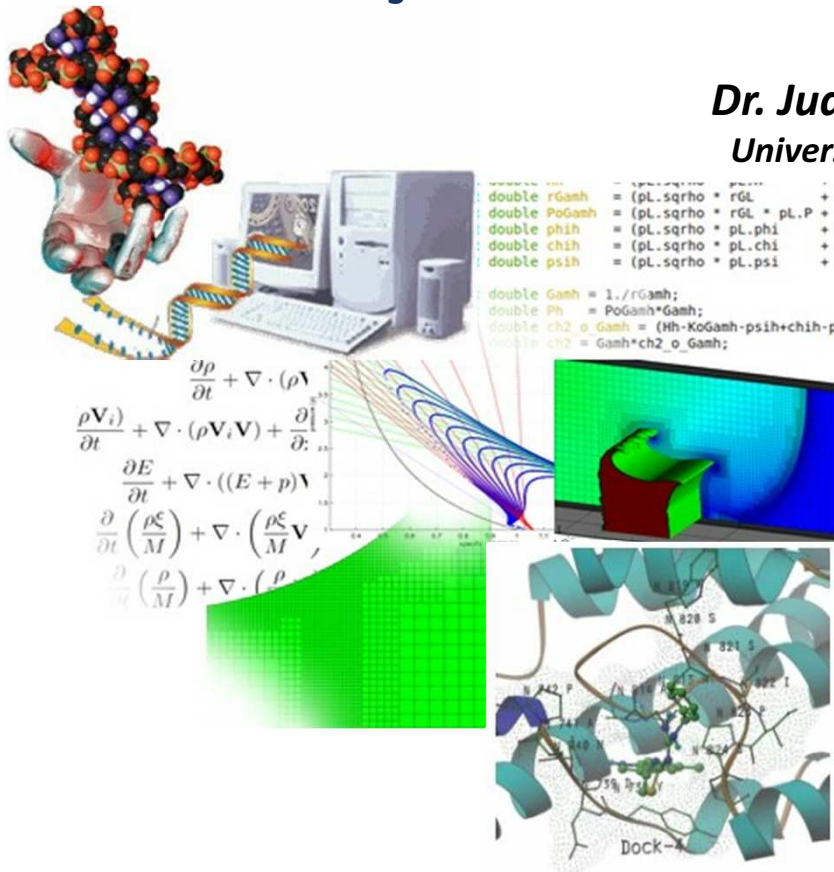


Colóquios da Física:

Introdução a Ciência Computacional de Materiais

Dr. Juarez L. F. Da Silva
Universidade de São Paulo



A Ciência Computacional de Materiais, combina conhecimentos em Física, Química, Matemática, e Computação de alto desempenho para o estudo de materiais em escala atômica. Grandes avanços realizados nos últimos 30 anos, permitiram a implementação de simulações computacionais utilizando métodos de primeiros princípios ou *ab initio* e contribuem de forma significativa para entender, melhorar, e desenvolver novos materiais para aplicações tecnológicas. Neste seminário discutiremos as principais aproximações utilizadas na Teoria do Funcional da Densidade, métodos e códigos computacionais utilizados para resolver a equação de Kohn-Sham, e exemplos de aplicações realizados em nosso grupo no estudo de clusters, nanopartículas, superfícies, e sólidos cristalinos.

Local: Sala 303, Bloco Didático I, Campus Catalão, UFG.

Data: 27 de abril de 2012

Horário: 17:30