

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE
MATERIAIS
CURSO DE MESTRADO E DOUTORADO**

Disciplina: Física Quântica de Materiais

Nº de créditos: 12

Professor responsável: Francisco Carlos Lavarda

Unidade: Faculdade de Ciências - UNESP/Bauru

Ementa:

- 1) Mecânica Clássica de Vibrações em Materiais: Fônons em Sistemas Massa-Mola Unidimensionais
- 2) Mecânica Quântica de Elétrons em Materiais: os Métodos das Ligações Fortes e de Huckel
- 3) O Método Hartree-Fock aplicado a Materiais: a Dedução das Equações de Hartree-Fock
- 4) Informações Suplementares: Conjuntos de Funções de Base, os Métodos Hartree-Fock Semiempíricos e a Teoria do Funcional da Densidade

Bibliografia básica:

- 1) Introdução à Física Quântica de Materiais, F.C. Lavarda.
- 2) Ligação Química, Audrey Companion, Editora Edgard Blücher, 1975.
- 3) Molecular Orbital Theory for Organic Chemists, A. Streitwieser, Wiley, New York, 1961.
- 4) Física Quântica de Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas, Robert Eisberg e Robert Resnick, Ed. Câmpus, Rio de Janeiro, 1979.
- 5) Modern Quantum Chemistry, A. Szabo e N.S. Ostlund, McGraw-Hill, New York, 1989.
- 6) Introduction to Computational Chemistry, Segunda Edição, F. Jensen, Wiley, Chichester, 2007.
- 7) Computational Chemistry Workbook - Learning Through Examples, T. Heine, J.O. Joswig, A. Gelessus, Wiley-VCH, Weinheim, 2009.
- 8) Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular, N. H. Morgon e K. Coutinho (Eds.), Editora Livraria da Física, São Paulo, 2007.
- 9) Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos: Simulação Computacional, J.D.M. Vianna, A. Fazzio e S. CANUTO, Ed. Livraria da Física, São Paulo, 2004.
- 10) A Handbook of Computational Chemistry, T.A. Clark, John Wiley and Sons, New York, 1985.

Data: