



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
SECRETARIA ACADÊMICA DE PÓS-GRADUAÇÃO (SAPG)

PROGRAMA ANALÍTICO

DISCIPLINA

Código: I ____ -1 _____	Nome: Teoria Quântica da Matéria Condensada: Méts. Computacionais
Créditos: 3	Carga Horária: 45

DEPARTAMENTO DE:

INSTITUTO DE: ICE

PROFESSOR(ES): Nome completo sem abreviações e matrícula SIAPE (UFRRJ) ou se de instituição de pesquisa o CPF. Endereço eletrônico para contato.

OBJETIVOS: Apresentar objetivo geral e/ou específico da disciplina. Este item pode ser exigido em alguns Programas de pós-graduação de forma mais extensa.

EMENTA: (i) Energia total e orbitais moleculares de pequenas moléculas; (ii) Sólidos

e redes cristalinas; (iii) Espaço recíproco, teorema de Bloch e estrutura de bandas; (iv) Teoria do funcional da densidade e cálculos de estrutura eletrônica com condições de contorno periódicas; (v) Estrutura eletrônica e energia total de estados estendidos em sólidos; (vi) Estrutura eletrônica e energia total de superfícies; (vii) Estrutura eletrônica de estados localizados em sólidos.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO:

1. Discriminar os temas apresentados na ementa na forma de itens e subitens.
2. O conteúdo programático pode e deve ser atualizado com frequência pelos professores, mantendo a obrigatoriedade de abordar os temas apresentados na ementa.
3. O programa deve ser adequado ao número de créditos da mesma e pode envolver atividades extraclasse com supervisão do professor responsável ou colaboradores eventuais, que são consideradas na carga horária adicional de 30 a 45 horas-aula por crédito prático.

METODOLOGIA: Item exigido em alguns Programas de Pós-graduação.

BIBLIOGRAFIA: (usar normas ABNT para as citações)

BÁSICA:

- R. M. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*, Cambridge University Press, UK (2004);
- E. Kaxiras, *Atomic and Electronic Structure of Solids*, Cambridge University Press, UK (2003);
- W.A. Harrison, *Electronic Structure and The Properties of Solids*, Dover Publications Inc, USA (1989);
- C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics - 7th ed.*, John Wiley & Sons Inc, USA (1996);
- N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College Publishing, USA (1976).

COMPLEMENTAR: Outras publicações disponíveis através do docente ou em bibliotecas que o aluno tenha acesso livre.

PERÍODICOS CIENTÍFICOS E OUTROS:O conteúdo do programa deve ser respaldado por bibliografia adequada e atual, que inclua periódicos e textos científicos de revisão relevantes na subárea de conhecimento da disciplina.