



PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO  
COORDENADORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO STRICTO SENSU  
ÁREA DO CONHECIMENTO DE CIÊNCIAS EXATAS E ENGENHARIAS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS –  
MESTRADO E DOUTORADO

**Disciplina:** Simulação Computacional

**Códigos:** Mestrado – PGM0930 / Doutorado – PGD0302

**Número de créditos:** 4

**Ementa**

Fundamentos da simulação computacional, métodos clássicos e quânticos. Hardware e software para simulação computacional. Técnicas de simulação de materiais usando potenciais parametrizados. Geração das estruturas iniciais e determinação das condições de simulação. Minimização da energia e cálculo de propriedades físicas. Simulação de espectros vibracionais (infravermelho e Raman). Dinâmica molecular e método Monte Carlo. Aplicações a moléculas, sólidos e superfícies. Métodos *ab initio* ou de primeiros princípios (Hartree-Fock e post-Hartree-Fock) e DFT (Density Functional Theory) e sua aplicação na simulação de sistemas moleculares simples. Fundamentos de mecânica quântica: estados, operadores, notação de Dirac, equações de autovalores. Sistemas simples: oscilador harmônico (solução analítica e numérica), átomo de hidrogênio (solução analítica e solução numérica numa base de funções gaussianas). Otimização da estrutura e cálculo *ab initio* de propriedades físicas de materiais. Aplicação de métodos *ab initio* na simulação de moléculas, sólidos e superfícies. Dinâmica molecular de primeiros princípios. Recursos computacionais para análise e representação dos resultados das simulações.