



**SECRETARIA GERAL  
DIVISÃO DE CONCURSOS DOCENTES**

**SOLICITAÇÃO ABERTURA DE EDITAL PARA CONCURSO PÚBLICO - PROFESSOR ADJUNTO**

<b>Área</b>	<b>Subárea</b>	<b>Conteúdo Programático</b>	<b>Bibliografia recomendada</b>	<b>Vagas</b>
Física	Simulação Computacional de Materiais	Vide anexo 1	Vide anexo 2	1

**Perfil do Candidato**

O candidato deve ter atuação competitiva de pesquisa em uma ou mais das seguintes áreas: simulação computacional aplicada à descrição de propriedades de átomos, moléculas, macromoléculas, agregados moleculares, materiais nanoestruturados, superfícies e interfaces, materiais avançados, materiais para energia. Desenvolvimento de métodos computacionais para descrição de propriedades eletrônicas, termodinâmicas, magnéticas, estruturais e/ou de transporte em materiais. Simulações atômicas e métodos de multiescala.

**Anexo 1 - Conteúdo Programático:**

**a) Para a prova escrita**

Leis da termodinâmica. Potenciais Termodinâmicos. Potencial Químico. Ensembles Estatísticos. Teoria Cinética dos Gases. Equação de Schrödinger. Teoria do orbital molecular. Método Hartree-Fock. Teoria do funcional da densidade. Estrutura eletrônica de átomos, moléculas e sólidos. Dinâmica Molecular clássica e quântica. Métodos de Monte Carlo clássicos e quânticos. Modelos atômicos empíricos de materiais. Simulações computacionais de materiais com aplicações em propriedades mecânicas e/ou eletrônicas e/ou magnéticas e/ou estruturais.

**b) Para a prova didática**

Fenômenos Mecânicos: Leis e grandezas físicas. Noções de cálculo diferencial e integral. Movimento de uma partícula. Noções de geometria vetorial. Força e inércia. Leis da dinâmica. Trabalho e energia mecânica. Momento linear. Colisões

Obs.: Anexar esta solicitação junto a CI.



Universidade Federal do ABC

## **SECRETARIA GERAL DIVISÃO DE CONCURSOS DOCENTES**

Fenômenos Térmicos: Temperatura e calor. Sistemas termodinâmicos. Variáveis termodinâmicas e sua natureza macroscópica. Teoria cinética do calor e dos gases. Primeira lei da termodinâmica. Processos irreversíveis e entropia. Segunda lei da termodinâmica. Conceitos de mecânica estatística. Informação e entropia.

Física Quântica: Bases experimentais da Mecânica Quântica. Quantização. Modelo de Bohr e átomo de hidrogênio. Equação de Schrödinger: função de onda, potenciais simples. Equação de autovalores para potenciais simples. Tunelamento. Relação de incerteza. Átomos. Momento Angular. Números quânticos. Energia de ionização e Spin. Dipolos magnéticos. Tabela Periódica. Lasers.

Interações Atômicas e Moleculares: Equação de Schrödinger do átomo de hidrogênio e hidrogenóides, orbitais atômicos e suas energias. Estrutura eletrônica de átomos multieletrônicos, aproximação orbital, princípio da exclusão de Pauli, preenchimento de orbitais, Teoria de ligação de Valência, Teoria do orbital molecular, Forças Intermoleculares, Tipos de Sólidos, Estrutura eletrônica e estrutura cristalina de sólidos. Teoria do Elétron Livre. Teoria das Bandas. Propriedades: elétricas, mecânicas, magnéticas e de transporte. Polímeros Orgânicos e macromoléculas. Técnicas de caracterização de sólidos (Espectroscopias de raios-X e Microscopias).

### **Anexo 2 - Bibliografia recomendada:**

#### **Para a Prova Escrita**

1. Adalberto Fazzio, José David M. Vianna, Sylvio Canuto, Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos: Simulação Computacional, Editora Livraria da Física, 2004.
2. Daan Frenkel e Berend Smit, Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, Academic Press, 2 ed., 2001.
3. Donald A McQuarrie, Simon; John D. Simon, Physical chemistry: a molecular approach. University Science Books, 1997.
4. Frederick Reif, Fundamentals of Statistical and Thermal Physics, Waveland Press Inc, 2008.
5. M. P. Allen, D. J. Tildesley, Computer simulation of liquids, Clarendon Press, 1987
6. Richard M. Martin, Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, Cambridge University Press, 2008.

Obs.: Anexar esta solicitação junto a CI.



**SECRETARIA GERAL  
DIVISÃO DE CONCURSOS DOCENTES**

**Prova Didática**

1. H. Moysés Nussenzveig, Curso de Física Básica, Editora Edgard Blücher Ltda
2. D. Halliday, R. Resnick, J. Walker, Fundamentos de Física, Editora LTC
3. R. A. Serway, J. W. Jewett Jr., Princípios de Física, Editora Thomson
4. R. B. Leighton, M. Sands, R. P. Feynman, The Feynman Lectures on Physics, Addison-Wesley
5. Julio De Paula e Peter Atkins Físico-Química. 9ª ed. : Editora LTC, 2012. vols. 1 e 2
6. Paul A. Tipler; Ralph Lewellyn, Física-Moderna. 5 ed. : Editora LTC, 2010

Obs.: Anexar esta solicitação junto a CI.