



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA  
INSTITUTO DE FÍSICA  
CURSO DE FÍSICA DE MATERIAIS - BACHARELADO

**FICHA DE DISCIPLINA**

**DISCIPLINA:** FÍSICA COMPUTACIONAL

**CÓDIGO:**

**UNIDADE ACADÊMICA:** INSTITUTO DE FÍSICA

**PERÍODO/SÉRIE:**

**CH TOTAL  
TEÓRICA:**

**CH TOTAL  
PRÁTICA:**

**CH TOTAL:**

60

--

60

**OBRIGATÓRIA:** ( )

**OPTATIVA:** ( X )

**OBS:**

**PRÉ-REQUISITOS:** Introdução à  
Computação, Cálculo Diferencial e Integral III

**CÓ-REQUISITOS:**

**OBJETIVOS**

Proporcionar ao estudante uma formação básica nos métodos e técnicas computacionais relacionadas ao trabalho de pesquisa científica na área de Física de Materiais.

**EMENTA**

1 – Programação científica básica; 2 – Soluções numéricas da equação de Schrödinger unidimensional; 3 – Métodos iterativos; 4 – Estudo e aplicação de um programa computacional para cálculo de propriedades eletrônicas de materiais.



## DESCRIÇÃO DO PROGRAMA

### 1. Programação científica básica

- 1.1 Programação em FORTRAN: zero de Funções
- 1.2 Programação em FORTRAN: integral numérica de funções unidimensionais
- 1.3 Programação em FORTRAN: resolução numérica de equações diferenciais unidimensionais

### 2. Soluções numéricas da equação de Schrödinger unidimensional

- 1.1. Poço de potencial quadrado infinito
- 1.2. Poços de potenciais quadrados finitos (simétricos e assimétricos)
- 1.3. Poços de potenciais não quadrados

### 3. Métodos iterativos

- 3.1. Heteroestrutura semicondutora

### 4. Estudo e aplicação de um programa computacional para cálculo de propriedades eletrônicas de materiais.

## BIBLIOGRAFIA

- EHRILCH, R.; TUSZYNSKI, J., ROELOFS, L. ; STOMER, R., *Electricity and Magnetism Simulations* – The Consortium for Upper-Level Physics Software, John Willey & Sons Inc., New York, 1995
- HILLER, J. R.; JOHNSTON, I. D. ; STYER, D. F. *Quantum Mechanics Simulations* – The Consortium for Upper-Level Physics Software, John Willey & Sons Inc., New York, 1995.
- JOHNSTON, I. D. ; KEELER, G., ROLLINS, R. ; SPICKELMIRE, S. *Solid State Physics Simulations* – The Consortium for Upper-Level Physics Software, John Willey & Sons Inc., New York, 1995.
- SHOKRANIAN, S. *Tópicos em Métodos Computacionais*. Rio de Janeiro: Ciência Moderna, 2009
- WILKINSON, J. H. *The Algebraic Eigenvalue Problem*, Oxford Science Publications, NY, 1965.,

## APROVAÇÃO

14 / 12 / 2009

Universidade Federal de Uberlândia  
Prof. Dr. Eduardo Kojy Takahashi  
Coordenador do Curso de Física de Materiais  
Portaria R nº 479/07

20 / 12 / 2009

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA  
Prof. Dr. Omar de Oliveira Diniz Neto  
Diretor do Instituto de Física-INFIS  
Portaria R nº 0420/05