



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE FÍSICA
CURSO DE LICENCIATURA EM FÍSICA

FICHA DE DISCIPLINA

DISCIPLINA: FÍSICA COMPUTACIONAL

CÓDIGO: GFC108

UNIDADE ACADÊMICA: Instituto de Física

PERÍODO/SÉRIE:

**CH TOTAL
TEÓRICA:**

**CH TOTAL
PRÁTICA:**

CH TOTAL:

OBRIGATÓRIA: () **OPTATIVA:** (X)

-

30

30

PRÉ-REQUISITOS:

CÓ-REQUISITOS: _____

OBJETIVOS

Utilizar métodos numéricos em programação científica
 Analisar a estabilidade de soluções de programas computacionais
 Utilizar linguagens de programação científica no desenvolvimento de programas relacionados à Física de Materiais.

EMENTA

Cálculo de integrais; Solução de equações diferenciais ordinárias; Solução da equação de Poisson; Método de Numerov para solução da equação de Schrödinger unidimensional; Cálculo de níveis de energia na quantização semi-clássica para o potencial de Lennard-Jones; Método Monte Carlo

DESCRIÇÃO DO PROGRAMA**Cálculo de integrais**

Método do trapézio

Método de Simpson 1/3 e 3/8

Projeto: programação de uma rotina para cálculo de integrais

Solução de equações diferenciais ordinárias

Métodos de Runge-Kutta

Método de Euler

Método de Numerov

Solução da equação de Poisson

A equação de Poisson

Estabilidade numérica

Projeto: programação de uma rotina para resolução da equação de Poisson

Método de Numerov para solução da equação de Schrödinger unidimensional

A Equação de Schrödinger

Estabilidade numérica

Projeto: programação de uma rotina para solução da equação de Schrödinger unidimensional

Cálculo de níveis de energia na quantização semi-clássica para o potencial de Lennard-Jones

O Potencial de Lennard-Jones

Projeto: programação de uma rotina para cálculo de integrais

Método Monte Carlo

O método Monte Carlo

Algoritmo de Metropolis

Projeto: programação de uma rotina para simulações Monte Carlo

BIBLIOGRAFIA

- 1) *D. Frenkel e B. Smit, Understanding Molecular Simulation – From Algorithms to Applications, Academic Press ((1996)*W. E. Milne, Numerical Solution of Differential Equations, Dover, New York (1970)
- 2) I. M. Smith, Programming in Fortran 90 - A First Course for Engineers and Scientists, John Wiley & Sons (1995)
- 3) J. H. Wilkinson The Algebraic Eigenvalue Problem, Clarendon Press, Oxford (1996)
- 4) XL Fortran for AIX – Language Reference – IBM
- 5) R. W. Hockney e J. W. Eastwood, Computer Simulation using Particles, Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia (1992)

APROVAÇÃO

____ / ____ / ____

Carimbo e assinatura do Coordenador do curso