

Concurso Público

CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Área: Física (cód. CNPq 1.05.00.00-6)/Física Atômica e Molecular (cód.CNPq 1.05.05.00-8)

Número de vagas: 2

Regime de trabalho: DE

Titulação Mínima Exigida: Graduação: Licenciatura em Física ou Bacharelado em Física e Pós-Graduação: Doutorado em Física ou Ciências Físicas ou Química ou Química teórica.

Horário e local das inscrições: Departamento de Física/CCE, UFES, Avenida Fernando Ferrari, 514, Campus Universitário de Goiabeiras, Vitória-ES, CEP:29075-910, de segunda à sexta-feira, no horário de 09:00h às 12:00h e 14:00 às 17h. Telefone (27) 4009-2832 / 4009-2482.

Programa

Programa: Tópicos Para a Prova escrita: 1. Estrutura eletrônica de moléculas: 1.1 Aproximação de Born- Oppenheimer; Expansão de Born Huang e estados eletrônicos excitados. 1.2. O método Hartree-Fock-Roothaan para moléculas; Funções de Base. 1.3 Método de Interação de Configurações. 1.4. Métodos Multiconfiguracionais e Multireferência. 1.5 Teoria de Perturbação de Moller-Plesset. 1.6 Teoria Coupled Cluster. 1.7. Teoria do Funcional da Densidade. 2. Teoria de Espalhamento. 2.1 Cálculo da seção de Choque. Espalhamento por um Potencial Central. Método de ondas parciais. 2.2. Espalhamento de Lippmann-Schwinger. 2.3. A Aproximação de Born. 2.4 Espalhamento em Baixas Energias e Estados Ligados. 2.5 Espalhamento ressonante.

Tópicos Para a prova de aptidão didática: 1. Fundamentos de Mecânica Quântica. 1.1. Os postulados da Mecânica Quântica e suas implicações. 1.2 Formalismos de Schroedinger e Heisenberg. 1.3 O Oscilador Harmônico. 1.4 . O átomo de Hidrogênio. 2. Teoria do Momento Angular em Mecânica Quântica. 2.1. Rotações e Relações de Comutação do Momento Angular. 2.2. Autovalores e Autovetores do Momento Angular de uma partícula. 2.3. Momento Angular Orbital de uma partícula. 2.4.. Adição de Momento Angular. 3. Métodos Aproximativos em Mecânica Quântica. 3.1. Teoria de Perturbação Independente do Tempo, Casos degenerado e não degenerado. 3.2. Teoria de Perturbação Dependente do Tempo. 3.3. Método Variacional. 3.4. Método WKB. 3.5. Átomos Hidrogenóides: Estrutura Fina e efeito Zeeman.

DAS PROVAS:

Constituirão provas do concurso:

- a) Prova escrita, de caráter eliminatório e classificatório;
- b) Prova de aptidão didático-prática, de caráter eliminatório e classificatório;
- c) Prova de plano de trabalho, de caráter apenas classificatório;
- d) Prova de títulos e de publicação de trabalhos científicos referidos no curriculum vitae do candidato, de caráter apenas classificatório.

Cada uma das provas descritas acima, excetuando-se a de títulos, será avaliada com notas definidas em uma escala de 0 (zero) a 100 (cem) pontos, em números inteiros.

5.2. Prováveis datas das provas:

- a) Escrita - 14/12/2015 - Eliminatória
- b) Aptidão didático-prática - 16/12/2015 - Eliminatória
- c) Plano de Trabalho - 17/12/2015 - Classificatória
- d) Títulos - 18/12/2015 - Classificatória

Referências Bibliográficas

1. T. Helgaker, P. Jørgensen e J. Olsen, *Molecular Electronic-Structure Theory*, John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2000.
2. J. J. Sakurai e J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*, Bookman, 2013.
3. W. J. Hehre, L. Radom, P. v.R. Schleyer e J. P. Pople, *Ab initio Molecular Orbital Theory*, John Wiley & Sons, New York, 1986.
4. F. Jensen, *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2007.
5. L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York, 1968.
6. C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloe, *Quantum Mechanics*, John Wiley & Sons, New York, 1977.
7. Ira N. Levine, *Quantum Chemistry*, Prentice Hall, New Jersey, 1991.
8. A. Szabo e N. S. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry - Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, McGraw-Hill, New York, 1989.
9. M. S. Child, *Molecular Collision Theory*, Academic Press, New York, 1979.
10. L. S. Rodberg e R. M. Thaler, *Introduction to the Quantum Theory of Scattering*, Academic Press, New York, 1967.