



Relação de Disciplinas

41010020 Programa de Pós-Graduação em Física ME

Disciplina	Nome da Disciplina	Créditos			Situação
		T	TP	P	
<b>FSC410093</b>	<b>TÓPICOS ESPECIAIS EM FÍSICA A: Dinâmica Eletrônica e Molecular</b> Ementa: 1. Separação de Born-Oppenheimer 2. Superfície de energia potencial e forças sobre átomos 3. Estados eletrônicos e vibracionais em moléculas 4. Métodos auto-consistentes para cálculo de estrutura eletrônica 5. (Hartree-Fock, Funcional de Densidade, Interação de Configurações (CI)) 6. Regras de seleção para transições intramoleculares 7. Dinâmica Molecular (conceitos e métodos) 8. Dinâmica em sistemas quânticos isolados e abertos 9. Representação diabática e adiabática do Hamiltoniano Molecular 10. Transferência Eletrônica 11. Interação com o campo Electromagnético 12. Transferência de Excitons  Bibliografia: 1. Charge and Energy Transfer Dynamics in Molecular Systems: A Theoretical Introduction, Volkhard May e Oliver Kühn, Wiley-VCH, Berlin, 1999.  2. Quantum Theory of the Solid State: An Introduction", Lev Kantorovich, Kluwer Academic Publishers, The Netherlands, 2004.  3. Chemical Dynamics in Condensed Phases: Relaxation, Transfer, and Reaction in Condensed Molecular Systems, Abraham Nitzan, Oxford Graduate Texts, Oxford, 2007.	4	0	0	Ativo