



Serviço Público Federal  
Universidade Federal de São Paulo  
Instituto de Ciência e Tecnologia



## Modelagem Computacional em Materiais

**Nível:** Mestrado Acadêmico

**Obrigatória:** Não

**Carga Horária:** 60

**Créditos:** 4

### **Ementa:**

Conceitos básicos. Considerações sobre modelagem computacional: Terminologia, Estrutura e Paradigma. Pré-requisitos matemáticos e físicos. Métodos Computacionais em escala Atômica/Microscópica. Métodos Computacionais em escala Mesoscópica/Macrocópica. Perspectivas em Modelagem de Materiais em Multiescala.

### **Bibliografia:**

1. Vianna, José David M; Fazzio, Adalberto; Canuto, Sylvio. - Teoria quântica de moléculas e sólidos: simulação computacional. São Paulo: Livraria da Física editora, 2004.
2. Rapaport, D. C. - The art of molecular dynamics simulation. 2nd ed.. Cambridge: Cambridge University, 2004.
3. Martin, Richard M. - Electronic structure: basic theory and practical methods. New York: Cambridge University Press, 2004.
4. Allen, M.P.; Tildesley, D. J. - Computer simulation of liquids. Oxford: Oxford University Press, 1989.
5. Leach, A. - Molecular Modelling: Principles and Applications (2nd Edition), Prentice Hall, 2001.
6. Steinhauser, M. O., Computational Multiscale Modeling of Fluids and Solids: Theory and Applications, Springer; 1st ed, 2008.
7. Junior, M. V, Neto, E. A. S., Rojas, P. A. M., Advanced Computational Materials Modeling: From Classical to Multi-Scale Techniques, Wiley-VCH, 2010.