



Concurso para Livre-Docência junto ao Departamento de Físico-Química, na especialidade “Teoria Quântica de Nanomateriais”, realizado nos termos do Edital IQSC/USP – 003/2022.

LISTA DE PONTOS PARA A PROVA ESCRITA

1. Equação de Schroedinger e átomo de hidrogênio.
2. Problema de muitos corpos em química quântica.
3. Teoria do funcional da densidade e suas aplicações
4. Funcionais de troca-correlação e suas limitações.
5. Funções de base utilizadas em cálculos de química quântica.
6. Fundamentos de química estrutural.
7. Estrutura atômica de clusters e nanopartículas.
8. Propriedades estruturais e eletrônicas de superfícies nanoestruturadas.
9. Adsorção de átomos, moléculas, e nanoclusters sobre superfícies.
10. Propriedades elétricas de nanomateriais.

São Carlos, 11 de julho de 2022

(cont.) Prova escrita

São Carlos, 12 de julho de 2022

Ponto sorteado: 08

Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Edson Antonio Ticianelli
Presidente da Comissão Julgadora