



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE MATO GROSSO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

1) IDENTIFICAÇÃO

Disciplina: Química Quântica Computacional

Código: 9281021

Carga Horária: 60 horas (4 créditos)

Optativa

2) EMENTA

Alguns aspectos da química quântica computacional. A filosofia da química quântica computacional. O que se pode fazer com a química quântica computacional. Otimização de geometria. A aproximação de Born-Openheimer. O conceito de superfície de energia potencial. ponto estacionário e modos normais de vibração. Energia de ponto zero. Métodos de cálculos ab initio. Os princípios do cálculo ab initio. Átomos monoelétrônicos. Átomos polieletrônicos e moléculas. Cálculos de orbitais moleculares. As equações de Hartree-Fock. Teoria do campo autoconsistente. O teorema de Koopman. Bases. Orbitais tipo Gaussiano e orbitais tipo Slater. Classificação dos conjuntos de bases. Contração de bases. Potencial efetivo do caroço. Superposição de erros. Teoria de funcional densidade (DFT). Os princípios básicos da DFT. O método de densidade local. O método do gradiente-corrigido. Métodos híbridos. Principais aplicações do método DFT. Métodos de correlação eletrônica. Interação de configuração. Método autoconsistente multiconfiguracional. Teoria de perturbação de Moeller-Plesset. Método coupled-cluster.

3) BIBLIOGRAFIA

- 1) A. R. Leach -Molecular modelling: principles and applications. Pearson Edu. Ltda (2001)
- 2) E. Lewars-Computational Chemistry. KluwerAcademic Publ. (2004).
- 3) F. Jansen –Introduction to computational chemistry. J. Wiley & Sons (1999).
- 4) K. I. Ramachandran, G. Deepa, K. Namboori-Computational Chemistry and Molecular Modeling: Principles and Applications. Springer-VerlagBerlin Heidelberg(2008).
- 5) Yves Jean, Molecular Orbitals of Transition Metals Complexes, Oxford University Press Inc., New York, 2005.