

## SÚMULA DA DISCIPLINA

### 1. Identificação

Código e nome da disciplina: QUP 143 – Métodos em Estrutura Eletrônica de Moléculas

Professor responsável: Paolo Roberto Livotto

Nível: Mestrado e Doutorado

Carga horária: 45h

Créditos: 3 (três)

Revisado e atualizado em: Outubro\_2019

### 2. Ementa

Postulados da Mecânica Quântica. Funções de onda para sistemas de muitos elétrons. Método de Hartree-Fock. Conjuntos de Base. Modelos de Conjunto de Base Completo. Correlação eletrônica. Métodos de incorporação da Correlação eletrônica : Interação de Configurações, Teoria de Perturbação de Moller-Plesset e Teoria de Coupled Clusters. Teoria do Funcional da Densidade. Métodos Semiempíricos.

### 3. Objetivo

Proporcionar uma abordagem do conhecimento concernente aos fundamentos, conceitos, aproximações e metodologias relacionadas à descrição mecânico quântica de sistemas moleculares na aproximação de funções de onda monoelétrônicas, nas metodologias multiconfiguracionais e nas abordagens baseadas na densidade eletrônica.

### 4. Conteúdo Programático

4.1. Postulados da Mecânica Quântica. Operadores hermitianos e suas propriedades.

4.2. Equação de Schroedinger molecular. Separação Born-Oppenheimer. Princípio de Pauli. Determinantes de Slater.

4.3. Método de Hartree-Fock. Equações de Hartree-Fock: Sistemas de camada aberta e fechada. Interpretação das soluções das Equações de Hartree-Fock. Correlação eletrônica

4.4. Equações de Roothaan-Hall. Conjuntos de funções de base. Modelos de Conjuntos de Base Completos extrapolativos e aditivos

4.5. Metodologias Pós-Hartree-Fock : Método de Interação de Configurações, Teoria de Perturbação de Moller-Plesset e Teoria de Coupled Clusters.

4.6. Teoria do Funcional da Densidade. Teoremas de Hohenberg-Kohn. Equações de Kohn-Sham. Funcionais de troca-correlação.

4.7. Métodos semiempíricos. Aproximação ZDO e derivadas. Estratégias de parametrização.

### 5. Avaliação

A avaliação será realizada através de seminário e uma prova escrita. Será considerado aprovado o aluno que obtiver conceito final A, B ou C, atribuídos conforme relação abaixo:

A - Ótimo (90 a 100%)

B - Bom (75% a 89%)

C - Regular (60 a 74%)

D - Insuficiente (abaixo de 60%) FF - Sem frequência



Universidade Federal do Rio Grande do Sul  
Instituto de Química  
Programa de Pós-Graduação em Química (Conceito 7/CAPES)  
Av. Bento Gonçalves, 9500 – Bairro Agronomia  
Porto Alegre – RS – 91501970  
☎ (51) 3308 6258 – Fax (51) 3308 7198  
<http://www.iq.ufrgs/ppgq> - e-mail: [ppgq\\_iq@ufrgs.br](mailto:ppgq_iq@ufrgs.br)

---

## 6. Método de Trabalho/Ensino

As aulas serão teórico-expositivas e ministradas envolvendo diferentes recursos didáticos incluindo leitura de textos, projeções, atividades on-line.

## 7. Bibliografia

- Attila Szabo e Neil S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, McGraw-Hill, 1989.
- Nelson H. Morgon e Kaline Coutinho, Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular, Livraria da Física, 2007.
- Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, 2ª ed, Wiley, 2007.
- Christopher J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, Wiley, 2004.
- Donald A. McQuarrie e John D. Simon, Physical Chemistry, University Science, 1997.