

SÚMULA DA DISCIPLINA ENSINO REMOTO EMERGENCIAL

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

6. Método de Trabalho/Ensino

O conteúdo programático será ministrado através de Ensino Remoto Especial, envolvendo aulas ministradas remotamente e com as avaliações realizadas remotamente (e/ou presencialmente). Serão utilizados recursos como MConf, ZOOM, Google Meeting, Microsoft Teams e outros para atividades síncronas – videoconferência e chats ou assíncronas - exercícios, tarefas, vídeos, etc. Os seminários, apresentados pelos alunos remotamente e online, versarão sobre temas atuais relacionados ao conteúdo programático.

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.