

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO QUÍMICA
PLANO DE ENSINO**

SEMESTRE 2015.2

I. IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:			TURMAS:
CÓDIGO	NOME DA DISCIPLINA	Nº DE HORAS-AULA SEMANAIS TEÓRICAS PRÁTICAS	TOTAL DE HORAS-AULA SEMESTRAIS
QMC3108	Tópicos especiais em Química Inorgânica: Uso prático de programas para cálculos de estrutura eletrônica e propriedades	04 0	72

I.1. HORÁRIO

TURMAS TEÓRICAS/PRÁTICAS

Quinta: 14-17:30h

II. PROFESSOR (ES) MINISTRANTE (S)

Prof. Bernardo de Souza

e-mail: bernardo.souza@ufsc.br

III CURSO (S) PARA O QUAL(IS) A DISCIPLINA É OFERECIDA

Mestrado e Doutorado

IV. EMENTA

Revisão da Quântica Molecular e da Teoria do Orbital Molecular. Apresentação dos softwares a sua utilização básica. O método Hartree-Fock-Roothaan, suas vantagens e limitações. Sobre funções de base e o limite. Otimização de Geometria. Teoria do Funcional de Densidade: LDA, GGA, meta-GGA e híbridos. Introdução à correlação dinâmica (MP2 e Coupled Cluster). Propriedades dependentes do tempo. Infravermelho. Absorção no UV/Vis. RMN. EPR. Propriedades Termodinâmicas.

V. OBJETIVOS

- Desenvolver de forma mais aplicada os conceitos da mecânica quântica molecular, utilizando a teoria para resolver problemas concretos envolvendo moléculas.
- Utilizar os softwares relacionados ao desenho e aos cálculos propriamente ditos.
- Realizar a otimização de geometrias, utilizando métodos de convergência variados.
- Resolver a estrutura eletrônica de moléculares diversas, utilizando diferentes métodos de convergência do SCF, funções de base e aproximações.
- Compreender a diferença básica entre o método Hartree-Fock-Roothaan e o DFT, bem como as vantagens e limitações de cada método.
- Compreender o conceito de correlação eletrônica e aplicar métodos para obter seu valor.
- Calcular propriedades como absorção espectro no infravermelho, UV/Vis e RMN.
- Calcular propriedades termodinâmicas (ΔG , ΔH e ΔS), conhecendo suas limitações e aplicações.

VI. METODOLOGIA DE ENSINO / DESENVOLVIMENTO DO PROGRAMA

Os recursos básicos utilizados serão aulas teóricas expositivas e participativas. As aulas serão basicamente “experimentais”, onde o foco será o “como” fazer os cálculos a partir da teoria. Cada aluno deve dispor de um computador ou poderá fazer em dupla.

VIII. METODOLOGIA DE AVALIAÇÃO

A avaliação do desempenho na disciplina se dará através de projetos envolvendo os conceitos discutidos em sala. Estes deverão ser desenvolvidos e apresentados em equipes, conforme será definido. Poderá haver avaliações na forma de prova caso seja julgado pertinente.

X. CRONOGRAMA

Total de aulas: 18 semanas. Aulas Teóricas: 72 Máximo de Faltas: 18

XII. BIBLIOGRAFIA BÁSICA

- 1.0 Cramer, C. J. *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, 2^a Ed, Wiley, 2004.
- 2.0 Helgaker, T., Jorgensen, P., *Molecular Electronic-Structure Theory*, 1^a Ed, Wiley, 2014.
- 3.0 Atkins, P.; Friedman, R. *Molecular Quantum Mechanics*, 5^a Ed, Oxford Press, 2011.
- 4.0 Levine, I., *Quantum Chemistry*, 7^a Ed, Pearson, 2013.
- 5.0 McQuarrie, D. A.; Simon, *Physical Chemistry: A Molecular Approach*, 1st. Ed. University Science Books, California, 1997.
- 6.0 Harris, D. C. *Symmetry and Spectroscopy*. Dover Publications, 1989.