



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
Centro de Ciências Físicas e Matemáticas
Departamento de Química
Programa de Pós-Graduação em Química
Campus Universitário-Trindade - 88040-900 - Florianópolis - SC - Brasil
Fone: (048) 3721-6849 - Fax: +55 48 3721 6850 - E-mail: ppgqmc@contato.ufsc.br

SEMESTRE 2015.2

I. IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:

CÓDIGO	NOME DA DISCIPLINA	Nº DE HORAS-AULA SEMANAIS TEÓRICAS	TOTAL DE HORAS-AULA SEMESTRAIS
QMC3423	Tópicos Especiais em Físico-Química (Introdução à Teoria da Estrutura Eletrônica Molecular II)	04	72

I.1. HORÁRIO

TURMAS TEÓRICAS

Segunda-feira: 13:30 – 15:10h (Sala PG1) e sexta-feira: 13:30 – 15:10h (Sala PG1)

II. PROFESSOR (ES) MINISTRANTE (S)

Giovanni Finoto Caramori - e-mail: giovanni.caramori@ufsc.br

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

Programa de Pós-Graduação em Química

IV. EMENTA

Interações de curta distância, Funções de base Gaussianas (GTOs), esquemas de contração, integrais moleculares, convergência de funções de base, erros de superposição de bases (BSSE), funções de Boys, Teoria de Hartree-Fock, Teoria de interações de configuração (CI), teoria coupled-cluster (cc), teoria da perturbação (MPn), Calibrações de modelos de estrutura eletrônica molecular.

V. OBJETIVOS

Gerais: Com base nos conhecimentos adquiridos durante o curso, o aluno deverá ser capaz de :
Enunciar e comentar os principais conceitos estudados; Aplicar os princípios de estrutura eletrônica molecular em cálculos computacionais de estrutura eletrônica.

Específicos:

- (i) Adquirir conhecimento sobre o uso de funções de base, bem como suas aplicações.
- (ii) Trabalhar com métodos de estrutura eletrônica molecular como HF, CI, CC, MPn.
- (iii) Compreender e aplicar modelos para resgate de correlação eletrônica.
- (iv) Compreender os formalismos dos métodos pós-Hartree Fock como: MPn, CI e CC no resgate da correlação eletrônica.
- (v) Caracterizar e distinguir os vários tipos de funções de base atômicas.

VI. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

1. Interações de curta distância

- 1.1. Buraco de Coulomb.
- 1.2. Cúspide de Coulomb
- 1.3. Aproximações para He.
- 1.4. Efeitos da correlação eletrônica

2. Funções de Bases Gaussianas:

- 2.1. Funções Gaussianas para cálculo HF
- 2.2. Funções Gaussianas para cálculos correlacionados.
- 2.3. Convergência de bases.
- 2.4. Erros de superposição de bases.

3. Determinação de integrais moleculares

- 3.1. Gaussiana cartesianas
- 3.2. Esquema de Obara-Saika.
- 3.3. Gaussianas de Hermite.
- 3.4. Esquema McMurchie-Davidson
- 3.5. Quadraturas gaussianas para integrais simples.
- 3.6. Integrais de Coulomb.
- 3.7. Funções de Boys.
- 3.8. Métodos de multipolos.

4. Teoria HF

- 4.1. Parametrização de funções de onda e energia
- 4.2. Função de onda HF.
- 4.3. Teoria HF canonica.
- 4.4. RHF.
- 4.5. Roothaan-Hall SCF.
- 4.6. Otimizações de segunda ordem.

5. Teoria CI

- 5.1. O modelo CI
- 5.2. Extensividade CI.
- 5.3. Modelo de H₂ não-interagente.
- 5.4. Parametrização da função CI.
- 5.5. Otimização da função CI.

6. SCF multiconfiguracional

- 6.1. Modelo MCSCF
- 6.2. Energia e função de onda MCSCF.
- 6.3. Considerações computacionais.
- 6.4. Parametrização exponencial do espaço de configurações.
- 6.5. Otimização da função CI.

7. Teoria “coupled-cluster” CC

- 7.1. Modelo CC
- 7.2. CC ansatz exponencial.
- 7.3. Extensividade em CC.
- 7.4. modelo CCSD camadas fechada e aberta.

8. Calibração de modelos de estrutura eletrônica

- 8.1. Molécula modelo
- 8.2. Erros em cálculos de estrutura eletrônica.
- 8.3. Distâncias e ângulos de ligação.

- 8.4. momentos de dipolo.
- 8.5. energias atômicas e moleculares.
- 8.6. Energias de atomização.
- 8.7. entalpias de reação e barreiras conformacionais.

VII. METODOLOGIA DE ENSINO / DESENVOLVIMENTO DO PROGRAMA

Os recursos básicos utilizados serão aulas teóricas expositivas, as quais empregaram recursos de multimídia. Além disso, aulas dedicadas à resolução de problemas propostos também serão realizadas.

VIII. METODOLOGIA DE AVALIAÇÃO

A avaliação do desempenho na disciplina se dará através de três provas, de mesmo peso. A média final será a média das três provas.

IX. NOVA AVALIAÇÃO (Substitutiva / Recuperação)

Recuperação: prova teórica no final do semestre versando sobre todo o conteúdo programático específico.

XII. BIBLIOGRAFIA BÁSICA

1. Helgaker, T.; Jorgensen, P.; Olsen, J.; *“Molecular Electronic-Structure Theory”* Willey, England, 2012.
2. Avery, J.; *“Creation and Annihilation Operators”*, McGraw-Hill, Inc. Great Britain, 1976.
3. Szabo A.; Ostlund, N. S.; *“Modern quantum Chemistry – Introduction to Advanced Eletronic Structure Theory”*; Dover, Inc., New York, 1989.
4. Merzbacher, E.; *“Quantum Mechanics”*; Wiley, New York, 1998.
5. Mcweeny, R.; *“Methods of Molecular Quantum Mechanics”*, Academic Press Inc., 1992