



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 2017.2

I. IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:

CÓDIGO	NOME DA DISCIPLINA	Nº DE HORAS-AULA SEMANAIS		TOTAL DE HORAS-AULA SEMESTRAIS
		TEÓRICAS	PRÁTICAS	
QMC3423	Tópicos Especiais em Físico Química: Química Quântica Avançada	04	0	72

I.1. HORÁRIO

TURMAS TEÓRICAS

Terça-feira: 08:30 – 10:10h (Sala PG1) e Quinta: 08:30 – 10:10h (Sala PG1)

II. PROFESSOR (ES) MINISTRANTE (S)

Prof. 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

Funções de onda multi-eletrônicas, operadores, Aproximação de Hartree-Fock, Configuração de interação, Teoria de pares acoplados, teoria perturbacional de vários corpos,

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 das aproximações de primeiros princípios da química quântica no cálculo da estrutura eletrônica de moléculas; Resolver problemas sobre os temas desenvolvidos.

Específicos:

Cálculo de Estrutura eletrônica de moléculas com métodos *ab initio*
Compreender e aplicar a aproximação Hartree-Fock
Compreender e aplicar os princípios de métodos pós-Hartree-Fock, incluindo CI, CCSD(T) e MPn
Compreender e aplicar os princípios para problemas de estrutura eletrônica molecular.

VI. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

1. Revisão matemática

- 1.1. Álgebra Linear.
- 1.2. Funções ortogonais
- 1.3. Operadores
- 1.4. Método Variacional

2. Funções de Onda multi-eletrônicas:

- 2.1. O problema eletrônico
- 2.2. Orbitais, determinantes de Slater

- 2.3. Funções de Base
- 2.4. Elementos de Matrix
- 2.5. Segunda-quantização
- 2.6. Configurações adaptadas por Spin

3. Aproximação de Hartree-Fock

- 3.1. Equações de Hartree-Fock
- 3.2. Derivação das equações de HF
- 3.3. Interpretação das Soluções HF
- 3.4. RHF, ROHF, e UHF
- 3.5. Moléculas H₂ e HeH⁺
- 3.6. Funções de base poliatômicas

4. Configuração de Interação

- 4.1. Funções de onda multiconfiguracionais
- 4.2. Excitações duplas
- 4.3. Orbitais Naturais
- 4.4. Funções de onda multiconfiguracionais
- 4.5. MCSCF e GVB
- 4.6. Funções de onda multiconfiguracionais

5. Teoria de Pares Acoplados

- 5.1. Aproximação do par de elétron independente IEPA
- 5.2. Pares acoplados CCA e CEPA

6. Teoria Perturbacional de vários corpos

- 6.1. Teoria de Rayleigh-Schroedinger
- 6.2. Representação Diagramática de RS
- 6.3. Teoria perturbacional orbital
- 6.4. Energia de correlação
- 6.5. Representação Diagramática de expansões perturbativas

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. PRÉ-REQUISITO

Ter cursado disciplinas introdutórias à química Quântica, como a QMC5403, QMC3433, ou equivalente.

X. NOVA AVALIAÇÃO (Substitutiva / Recuperação)

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

Prova 1 – 14/09/2017

Prova 2 – 19/10/2017

Prova 3 – 23/11/2017

Prova (rec) – 30/11/2017

XI. BIBLIOGRAFIA BÁSICA

1. Szabo A.; Ostlund, N. S. *Modern Quantum chemistry – Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, dover, New York, 1989.
2. Cook, D, B.; *HandBook of Computational Quantum Chemistry*, Dover, New York, 2005
3. Helgaker, T.; Jorgensen, P.; Olsen, Jeppe *Molecular Electronic-Structure Theory*, Wiley, New York, 2002
4. Merzbacher, E. *Quantum Mechanics*, Wiley New York, 1970.