

FICHA DE DISCIPLINA DE PÓS-GRADUAÇÃO

Sigla e título:	FQ-291 – Métodos da Química Quântica Molecular
Acronym and title:	FQ-291 – Molecular Quantum Chemistry Methods

Ementa:	
Métodos aproximados para solução da equação de Schrödinger: método variacional e teoria de perturbação. Princípio da anti-simetria e a aproximação de Born-Oppenheimer. Orbitais atômicos e moleculares, produto de Hartree e determinante de Slater. Método de Hartree-Fock, métodos do funcional da densidade, método multiconfiguracional Hartree-Fock, método interação de configurações e método Coupled Cluster. Aplicações a sistemas moleculares utilizando códigos computacionais atuais	

Syllabus:	
Approximate methods to solve the Schrödinger equation: variational method and perturbation theory. The antisymmetry wave function and the Born-Oppenheimer approximation. Atomic and molecular orbitals, Hartree product and Slater determinant. The Hartree-Fock method, the density functional methods, The multiconfiguration Self-Consistent Field method, The Configuration Interaction method, and Coupled Cluster method. Applications to molecular systems using current computational codes.	

Carga horária semanal	3-0-0-6	Crédito máximo	Até 3
------------------------------	---------	-----------------------	-------

Requisitos	Recomendado	Não há
	Exigido	FQ-290 ou FF-201

Bibliografia recomendada	
1	McQUARRIE, D. A. Quantum Chemistry . 2 nd ed. University Science Books, 2008.
2	MORGON, N. H.; COUTINHO, K. Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular . Livraria da Física, 2007.
3	JENSEN, F. Introduction to Computational Chemistry . 2 nd ed. Willey, 2007.

Responsável pela ementa	Francisco Bolivar Correto Machado
--------------------------------	-----------------------------------

Se for disciplina de leitura, indicar os alunos:	
--	--