

## Química Computacional I

Créditos: 04

Carga Horária: 60 horas

**Ementa:** Revisão de Mecânica Quântica. O Método de Hartree-Fock. Teoria do Orbital Molecular. Construção dos Conjuntos de Base. Métodos Correlacionados (Pós-Hartree-Fock). Teoria do Funcional da Densidade. Métodos Atuais.

### Programa:

#### 1. Revisão de Mecânica Quântica.

- Função de Onda;
- Operador;
- Átomo de Hidrogênio;
- Determinantes de Slater;
- Átomos Multi-Eletrônicos

#### 2. O Método de Hartree-Fock.

- Energia de um Determinante de Slater;
- As Equações de Hartree-Fock e o Método Variacional;
- Operadores de Coulomb e de Troca;
- O Método Auto-Consistente;
- Falhas da Aproximação Hartree-Fock.

#### 3. Teoria do Orbital Molecular.

- A Introdução das Funções de Base;
- As Equações de Hartree-Fock-Roothaan;
- Matriz de Densidade;
- A Ortogonalização da Base e o Método Iterativo.

#### 4. Construção dos Conjuntos de Base.

- A Introdução das Funções Gaussianas para representar as Funções de Slater;

#### 5. Métodos Correlacionados (Pós-Hartree-Fock).

- O Método de Interação de Configuração (CI);
- Teoria de Perturbação de Moller-Plesset ( $MP_n$ );
- O Método MCSCF;
- Os Métodos Coupled-Cluster (CC).

#### 6. Teoria do Funcional da Densidade.

- As Equações de Kohn-Sham e a Densidade Eletrônica;
- Principais Aproximações e Métodos envolvidos na Teoria DFT.

### Referências Bibliográficas:

- Jensen, F., **Introduction to Computational Chemistry**, John Wiley & Sons, New York, 2002.
- Cramer, C.J., **Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models**, 2<sup>a</sup> ed., John Wiley & Sons, New York, 2002.

- Szabo, A; Ostlund, N. S., **Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory**, Dover Publications, New York, 1989.
- Foresman, J.B.; Frisch, A., **Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods: A Guide to Using Gaussian**, *Gaussian Inc.*, 1993.
- Artigos recentes da literatura.