



TEQ IX – QUÍMICA QUÂNTICA AVANÇADA

Código: PQ513

Área de Concentração: Química

Carga Horária: 60

Créditos: 4

Responsáveis: Prof. Eduardo de Faria Franca

Objetivos:

Revisar os fundamentos de mecânica quântica, introduzir as novas teorias quânticas e aplicar essas teorias na descrição de interações envolvendo sistemas moleculares, utilizando ferramentas computacionais.

Ementa:

- 1 – Revisão dos fundamentos da Mecânica Quântica
- 2 – Momento Angular em Mecânica Quântica
- 3 – O método Variacional
- 4 – Método de Hartree-Fock
- 5 – Implementações semi-empíricas da Teoria do Orbital Molecular
- 6 – Teoria da Perturbação de Moller-Plesset
- 7 – Teoria do Funcional de Densidade (DFT)
- 8 – Método “Coupled-Cluster”
- 9 – Métodos multiconfiguracionais
- 10 – Métodos híbridos (QM/MM)
- 11 – Modelos mecânico-quânticos de solvatação
- 12 – Aplicações da Mecânica Quântica para moléculas no estado fundamental
- 13 – Aplicações da Mecânica Quântica para moléculas no estado excitado

Programa:

Semana, por ordem

- 1^a - Apresentação da disciplina, das formas de avaliação e revisão dos postulados da Mecânica Quântica
- 2^a - Revisão de Partícula na Caixa, oscilador harmônico e átomo de hidrogênio
- 3^a - Momento Angular em Mecânica Quântica
- 4^a - Acoplamento spin-orbita
- 5^a - O método Variacional e aplicação de avaliação
- 6^a - Método de Hartree-Fock e descrição das funções de bases atômicas
- 7^a - Métodos semi-empíricos
- 8^a - **Prática 1:** Cálculos ab-initio e semi-empíricos de moléculas
- 9^a - Teoria da Perturbação de Moller-Plesset



- 10^a - Teoria do Funcional de Densidade (DFT)
11^a - Método "Coupled-Cluster"
12^a - Métodos multiconfiguracionais
13^a - **Prática 2:** Cálculos mecânicos quânticos envolvendo correlação eletrônica
14^a - Métodos híbridos (QM/MM)
15^a - Modelos mecânico-quânticos de solvatação: implícita, discreta e híbrida.
16^a - **Prática 3:** Cálculo da estrutura eletrônica usando modelos de solvatação
17^a - Seminários
18^a - Seminários/ Conclusão da disciplina.

Avaliações: Seminários, Trabalhos e provas práticas.

Bibliografia:

1. MORGON, N.H.; COUTINHO, K *Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular*, (Ed.) Livraria da Física Editora, São Paulo, 2007.
2. CRAMER, C. J. *Essentials of Computational Chemistry*, 2^a ed., Wiley, USA, 2004.
3. JENSEN, F. *Introduction to Computational Chemistry*, 2^a ed., Wiley, Denmark, 2007.
4. HINCHLIFE, A. *Molecular Modelling for Beginners*, 2^a ed., Wiley, UK, 2008.
5. LEVINE, I. N. *Quantum Chemistry*, 5^a ed., Prentice Hall, USA, 2000.
6. LEVINE, I. N. *Quantum Chemistry*, 4^a ed., Prentice Hall, USA, 1991.
7. Artigos da literatura recentes sobre química computacional, química teórica ou modelagem molecular.