

QUÍMICA QUÂNTICA AVANÇADA

Nível: Mestrado Acadêmico

Área de Concentração: Físico-Química

Carga Horária: 60

Créditos: 4

Ementa: Álgebra matricial. Operadores e autofunções. Métodos de aproximação. Sistemas multieletrônicos. Unidades atômicas. Spin. Determinantes de Slater. Expressão para energia de um único determinante. Aproximação de Hartree-Fock: equações e interpretação das soluções. Método de Hartree-Fock-Roothaan de camada fechada.

Bibliografia:

1. SZABO, A.; OSTLUND, N. S. Modern Quantum Chemistry. Mineola: Dover, 1996.
2. CHANDRA, A. K. Introductory quantum chemistry. New Delhi: McGraw-Hill Ed., 1994.
3. HELGAKER, T.; JORGENSEN, P.; OLSEN, J. Molecular Electronic-Structure Theory. Chichester: John Wiley & Sons, 2000.
4. LEVINE, I. N. Quantum Chemistry. 5. Ed. New Jersey: Prentice Hall, 2000.
5. COOK, D. B. Handbook of Computational Chemistry. Mineola: Dover, 2005.