

Programa: QUÍMICA (15025012071P6)

Disciplina: QUÍMICA COMPUTACIONAL

Sigla: PPGQU0049

Carga Horária: 60h

Créditos: 04

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.

Bibliografia:

Jensen, F., Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons, New York, 2002.

Cramer, C.J., Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2a 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.