



### DADOS DE IDENTIFICAÇÃO E ATRIBUTOS<sup>1</sup>

CARGA HORÁRIA (estudante)							MODALIDADE/ SUBMODALIDADE	PRÉ-REQUISITO (POR CURSO)					
T	T/P	P	PP	Ext	E	TOTAL	Disciplina/Teórica						
30						30							
CARGA HORÁRIA (docente/turma)							MÓDULO						SEMESTRE DE INÍCIO DA VIGÊNCIA
T	T/P	P	PP	Ext	E	TOTAL	T	T/ P	P	PP	Ext t	E	2024.2
30						30	30						

#### EMENTA

Introdução às técnicas principais da Química Computacional. Hartree-Fock, Teoria do Funcional da Densidade, Métodos Perturbativos e Métodos Multiconfiguracionais.

#### OBJETIVOS

##### OBJETIVO GERAL

Capacitar os estudantes a compreenderem os princípios básicos relacionados à aplicação da Mecânica Quântica em Química pelo uso de simulações computacionais e suas diferentes abordagens.

##### OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1. Revisão de Mecânica Quântica com ênfase em sua formulação baseada em álgebra linear
2. Apresentar, em grau de complexidade crescente, os desafios práticos para a solução da Equação de Schrödinger Independente do Tempo para sistemas de muitos corpos
4. Compreensão das limitações e vantagens de cada um dos métodos discutidos.
5. Avaliar, para sistemas reais, a aplicabilidade e limitação dos resultados baseando-se na aproximação utilizada.

#### CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

1. Revisão de Mecânica Quântica
  - a. Postulados da Mecânica Quântica
  - b. Autovalores e Autovetores
  - c. Notação de Dirac
2. Método Hartree-Fock
3. Introdução à Teoria do Funcional da Densidade Independente do Tempo
4. Introdução à Teoria de Perturbação Independente do Tempo
5. Introdução aos métodos Multiconfiguracionais
  - a. Complete Active Space Self-Consistent Field (CASSCF)
  - b. Coupled-Cluster

#### METODOLOGIA DE ENSINO-APRENDIZAGEM

Aulas expositivas por meio de quadro e giz e projeção de slides, resolução de exercícios, discussão de casos da literatura, apresentação de seminários e avaliações escritas da aprendizagem.

<sup>1</sup> Os "dados de identificação e atributos" devem estar registrados conforme especificado no Programa do Componente Curricular e disponível no site da Superintendência Acadêmica (SUPAC)SIAC. O único campo a ser preenchido nesse tópico do formulário é o que diz respeito ao módulo de vagas ofertadas.

## AVALIAÇÃO DA APRENDIZAGEM

A disciplina contará com duas avaliações escritas e um trabalho de conclusão da disciplina, composto por um texto em formato científico e uma apresentação em formato de seminário. A nota final do estudante será dada pela soma da média aritmética das notas das duas provas, multiplicada por 0,7, e da nota do trabalho de conclusão da disciplina, multiplicada por 0,3.

### REFERÊNCIAS

#### REFERÊNCIAS BÁSICAS

1. Cramer, J. C., Essentials of Computational Chemistry: Theory and Models, 2<sup>nd</sup> Edition, John Wiley & Sons, 2004
2. Jansn, H. J., Molecular Modeling Basics, CRC Press, 1<sup>st</sup> Edition, 2010
3. Morgon, N.H., Coutinho, K. (orgs), Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular, Editora Livraria da Física, 2007.
4. Szabo, A.; Ostlund, N.S.; Modern Quantum Chemistry, Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, Dover, 1996

#### REFERÊNCIAS COMPLEMENTARES

1. Helgaker, T.; Jorgensen, P.; Olsen; Molecular Electronic-Structure Theory, John Wiley & Sons, 2014.
2. Pilar, F.L.; Elementary Quantum Chemistry, 2nd Edition, Dover, 2001.
3. Yang. W.; Parr, R.G.; Density-Functional Theory of Molecules, Oxford University Press, 1989.

---

**Aprovado em reunião de Departamento (ou equivalente)<sup>2</sup>:** \_\_\_\_\_ em \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_  
Assinatura do Chefe do Departamento/ Coordenador Acadêmico

---

---

<sup>2</sup> O plano de ensino-aprendizagem é um documento que tramita internamente na Unidade acadêmica (especificamente no departamento ou coordenação acadêmica), não sendo necessário encaminhá-lo à Prograd nem à Supac, após aprovação pela instância responsável.