

## MÉTODOS EM MECÂNICA QUÂNTICA MOLECULAR

**Ementa:** As equações de Hartree-Fock. Os operadores de Coulomb e de troca. O operador de Fock. Energias orbitais e o teorema de Koopmans. As equações de Hartree-Fock-Roothaan para camada fechada e aberta (tratamento restrito e não-restrito). Conjuntos de base para cálculo de propriedades de átomos e moléculas. O método de interação de configurações (CI). CI truncado. CI e extensividade. Teoria de perturbação de Rayleigh-Schrödinger MBPT. O método "Coupled-Cluster. O método da coordenada geradora Hartree-Fock. A solução das equações de GHW-HF. Introdução aos métodos semi-empíricos e suas parametrizações.

### **Bibliografia:**

1. Szabo, A. & Ostlund, N.S. Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, MacMillan Publishing Co., Inc., New York, 1982.
2. Leach, A. R. Molecular Modelling: Principles and Applications. Prentice Hall, 2001.
3. Helgaker, T.; Olsen, J.; Jorgensen, P. Molecular Electronic-Structure Theory. Wiley, 1 edição, 2013.
4. Friedman, A. Susskind, L. Quantum Mechanics: The Theoretical Minimum. Basic Books, 2014.
5. Griffiths, D. J. Introduction to Quantum Mechanics. Pearson Prentice Hall, 2<sup>nd</sup> edition, 2004.
6. Zettili, N. Quantum Mechanics: Concepts and Applications. Willey, 2 edtion, 2009.
7. Townsend, J. S. A Modern Approach to Quantum Mechanics. University Science Books, 2 edtion, 2012.
8. Sakurai, J.J.; Napolitano, J.J. Modern Quantum Mechanics, 2<sup>nd</sup> Edition, Addison-Wesley, 2010.
9. Albright, T. A.; Burdett, J. K.; Whangbo, M.H. Orbital Interaction in Chemistry. Wiley-Interscience, 2<sup>nd</sup> edition, 2013.
10. Schatz, G.C.; Ratner, M.A. Quantum Mechanics in Chemistry. Dover Publication; 1 edition, 2002.
11. Cramer, C. J. Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models. Wiley, 2<sup>nd</sup> edition, 2004.
12. Marx, D.; Huttler, J. An Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advance Methods. Cambridge University Press, Reprint edition, 2012.
13. Sholl, D.; Steckel, J. A. Density Functional Theory: A Pratical Intruduction. Wiley-Interscience, 1 edition, 2009.
14. Kohanoff, J. Electronic Structure Calculations For Solids and Molecules: Theory and Computational Methods. Cambridge University Press, 2006.