



UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL PARANÁ
DEPARTAMENTO ACADÊMICO DE QUÍMICA E BIOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

QUÍMICA QUÂNTICA AVANÇADA

Nível: Mestrado Acadêmico

Área de Concentração: 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.