



# Universidade Federal do Oeste da Bahia

Centro das Ciências Exatas e das Tecnologias  
Programa de Pós-Graduação em Química Pura e Aplicada



<b>Tipo do Componente Curricular:</b> Disciplina	
<b>Unidade Responsável:</b> Programa de Pós-Graduação em Química Pura e Aplicada	
<b>Nome:</b> Tópicos avançados em físico-química teórica	
<b>Código:</b> QUI0027	
<b>Carga Horária Teórica:</b> 60 h.	<b>Carga Horária Prática:</b> 0 h.
<b>Carga Horária Total:</b> 60 h.	<b>Excluir da Avaliação Institucional:</b> Não
<b>Matriculável On-Line:</b> Sim	<b>Horário Flexível da Turma:</b> Não
<b>Horário Flexível do Docente:</b> Sim	<b>Obrigatoriedade de Conceito:</b> Sim
<b>Pode Criar Turma Sem Solicitação:</b> Não	<b>Necessita de Orientador:</b> Não
<b>Exige Horário:</b> Sim	<b>Permite CH Compartilhada:</b> Não
<b>Quantidade de Avaliações:</b> 3	
<b>Ementa/Descrição:</b> Método variacional; Teorema de variação; Determinante de Slater; Funções de variação linear como <i>overlap</i> ; Teoria de perturbação; Perturbação de primeira e segunda ordem; Níveis de energia degenerados e estados excitados; Átomos com muitos elétrons; Método de Hartree-Fock; Correlação eletrônica; Hamiltoniano e interação spin órbita; Teorias de estrutura eletrônica; Orbital molecular e teoria de valência; Tratamento <i>ab initio</i> e DFT; SCF-MO; Conjuntos de base; MP2 e DFT.	
<b>Referências:</b> 1. I. Levine, <i>Quantum chemistry</i> , 5 <sup>th</sup> ed., Pearson Education, 2000. 2. C.J. Cramer, <i>Essentials of computational chemistry: theories and models</i> , 2 <sup>nd</sup> ed. Wiley, 2004.	