

Caracterização da disciplina

Código da disciplina:	NHT4049.14	Nome da disciplina:	Estrutura da Matéria Avançada
Créditos (T-P-I):	(2-4-8)	Carga horária:	72 horas

Planejamento da disciplina
Objetivos gerais

O objetivo da disciplina é apresentar algumas ferramentas de modelagem molecular aplicadas à Química. Os fundamentos de estrutura da matéria, em especial da teoria quântica, serão abordados juntamente com atividades práticas no laboratório de informática. Espera-se que, ao final do curso, o estudante seja capaz de traduzir um problema experimental num modelo computacional, respeitando a aplicabilidade e as limitações de cada método.

Objetivos específicos

Mostrar aplicações práticas em Química da teoria quântica da matéria, por meio de ferramentas de modelagem molecular. Trabalhar com ferramentas computacionais (montagem de um modelo, criação de arquivos de entrada, execução de simulações, análise dos resultados).

Ementa

FUNDAMENTOS DA TEORIA QUÂNTICA. Equação de Schrödinger (propriedades, interpretação, soluções simples, estados estacionários). Átomo de hidrogênio. Funções de onda para átomos multieletrônicos. Teorema variacional e teoria de perturbações (exemplo do átomo de He).

TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR. Aproximação de Born-Oppenheimer. Hamiltoniano eletrônico. Método de Hartree-Fock. Correlação eletrônica. Aproximações semi-empíricas. Teorema de Hellman-Feynman.

DINÂMICA MOLECULAR. Elementos de Mecânica Estatística. Equações de Lagrange e Hamilton. Construção de Hamiltonianos empíricos. Dinâmica molecular. Termostatos (dinâmica no *ensemble* NPT).

MÉTODOS AVANÇADOS DE ESTRUTURA ELETRÔNICA. Método de interação de configurações. Teoria de perturbação. Introdução à Teoria do Funcional da Densidade. Dinâmica molecular quântica (método de Car-Parinello).

Descrição dos instrumentos e critérios de avaliação qualitativa

Nesta disciplina a avaliação do rendimento do aluno é realizada em função do seu aproveitamento em provas teóricas, seminários, trabalhos de campo, entre outros, conforme exigido pelo docente. A modalidade e pesos de cada avaliação serão determinados pelo docente, levando em consideração as particularidades dos conteúdos trabalhados.

Os conceitos a serem atribuídos aos estudantes não deverão estar rigidamente relacionados a qualquer nota numérica de provas, trabalhos ou exercícios. Os resultados também considerarão a capacidade do aluno de utilizar os conceitos e material das disciplinas, criatividade, originalidade, clareza de apresentação e participação em sala de aula e laboratórios. O aluno será informado sobre as normas e critérios de avaliação que serão considerados ao se iniciar a disciplina.

Referências bibliográficas básicas

1. MCQUARRIE, D.A. **Quantum chemistry**. 2a ed. Califórnia, USA: University Science Books, 1983.
2. VIANNA, J.D.M. et al. **Teoria quântica de moléculas e sólidos: simulação computacional**. São Paulo, SP: Livraria da Física. 2004.
3. ALLEN, M.P. et al. **Computer simulation of liquids**. Oxford - USA: Clarendon Press, 1989.

Referências bibliográficas complementares

1. ATKINS, Peter William; PAULA, Julio de. **Físico-química: fundamentos**. Tradução de Oswaldo Esteves Barcia, Edilson Clemente da Silva. 5. ed. Rio de Janeiro, 2011
2. EISBERG, R. **Física Quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas**. Rio de Janeiro: Campus, 1979.
3. FRENKEL, D. et al. **Understanding molecular simulation, v. 1: from algorithms to applications**. 2 a ed. San Diego, USA: Academic Press, 2002. 638 p.
4. SCHATZ, G.C.; RATNER, M.A. **Quantum mechanics in chemistry**. New York, USA: Dover. 2002.
5. CALAIS, J.L. **Quantum Chemistry Workbook: Basic Concepts and Procedures in the theory of Electronic Structure of Matter**. New York: Wiley. 1994

Recomendações

Recomenda-se que o aluno se matricule nessa disciplina após ter concluído FUV, Estrutura da Matéria, Física Quântica, Interações Atômicas e Moleculares, FVV, TQ.