

IQU-830 Química Quântica I (60h)

Ementa:

Inadequabilidade do modelo clássico. Postulados de mecânica quântica. Mecânica quântica de sistemas simples. Átomo de hidrogênio. Átomos polieletrônicos. Métodos aproximados: método da variação e da perturbação. Teoria do campo autoconsistente. Simetria. Estrutura eletrônica de moléculas. Métodos dos orbitais moleculares e VB-Modelos aproximados para sistemas conjugados.

Bibliografia:

1. P. W. Atkins; R. S. Friedman. Molecular Quantum Mechanics, 3<sup>o</sup> ed., Oxford University Press, 545 pp., 1997.
2. I. Levine. Quantum Chemistry, 4<sup>o</sup> ed., Prentice Hall Inc., 739 pp., 1991.
3. F. L. Pilar. Elementary Quantum Chemistry, 2<sup>o</sup> ed., Mc Graw Hill, 599 pp., 1990.
4. J. P. Lowe. Quantum Chemistry, 2<sup>o</sup> ed., Academic Press, 1993.