Disciplina: Seminários aplicados à Química Computacional

Carga horária: 64 horas

Horário das aulas: às quartas e às sextas das 18:30 às 20:10

Ementa: Introdução ao cálculo de estrutura eletrônica, evolução dos modelos físico-matemáticos, os postulados da mecânica quântica, tratamento estatístico de dados teóricos, fundamentos de espectroscopia (eletrônica, vibracional e de ressonância magnética nuclear), Métodos quirópticos para caracterização de micromoléculas, cinética e reações químicas ancoramento molecular e estudo de dinâmica clássica.

Bibliografia

1.Physical Chemistry, 6a Ed. 2008, Levine I.N, Editora: McGraw-Hill College.
2. GRIFFITHS, D. Mecânica Quântica. 2. ed. Pearson Education, 2011.
3.PIZA, A . F. R.T. Mecânica quântica. 2. ed. São Paulo: Edusp, 2009.
4. ROBINETT, R. W. Quantum mechanics: classical results, modern systems, and visualized examples. 2nd ed. Oxford: Oxford University Press, 2006.
5. Introduction to Computational Chemistry, Frank Jensen, Wiley; 2007
4. Artigos científicos.