



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO**

Via Washington Luís, Km 235 - Caixa Postal 676

Fones: (16) 3351-8109 / 3351-8110

Fax: (16) 3361-3176

CEP 13.565-905 - São Carlos - SP - Brasil

End. Eletrônico: progg@ufscar.br

FICHA DE CARACTERIZAÇÃO DE DISCIPLINAS

1. Programa de Pós-Graduação em:

Programa de Pós-Graduação em Química

2. Objetivo da Ficha: Criação de disciplina.

Código da Disciplina	QUI.341	Total de Créditos	13	Início de Validade	1o. período de 2008
----------------------	---------	-------------------	----	--------------------	---------------------

Nome da Disciplina	Química Quântica 2
--------------------	--------------------

Campos a serem Alterados

<input type="checkbox"/> Código da Disciplina	<input type="checkbox"/> Nome da Disciplina	<input type="checkbox"/> Carga Horária	<input type="checkbox"/> Ementa
Código Anterior:	<input type="checkbox"/> Créditos	<input type="checkbox"/> Pré-Requisitos	

Justificativa:

3. Carga Horária da Disciplina:

Aulas Teóricas	72	Aulas Práticas	0	Exercícios e Seminários	123
----------------	----	----------------	---	-------------------------	-----

4. Ementa da Disciplina:

1. Átomos polieletrônicos 2. Métodos de Hartree-Fock 3. Métodos mais sofisticados do que Hartree-Fock 4. Introdução a moléculas diatômicas 5. Teoria da ligação de valência 6. Métodos de orbital molecular 7. Métodos de configuração de interações e MCSCF para cálculos moleculares 8. Espectroscopia atômica e molecular

5. Caráter da Disciplina:

Criada para o curso de:

Mestrado

Doutorado

Mestrado Profissional

Todos

Caráter para mestrado:

Obrigatória para:

Optativa para: Físico-Química, Química, Química Analítica, Química Inorgânica, Química Orgânica.

Alternativa para:

Área de Concentração para:

Específica de Linha para:

Caráter para doutorado:

Obrigatória para:

Optativa para: Físico-Química, Química, Química Analítica, Química Inorgânica, Química Orgânica.

Alternativa para:

Área de Concentração para:

Específica de Linha para:

Caráter para mestrado profissional:

Obrigatória para:

Optativa para: Ensino em Química, Química Tecnológica.

Alternativa para:

Área de Concentração para:

Específica de Linha para:

6. Disciplinas que São Pré-Requisitos:

QUI.302 - Química Quântica 1

7. Bibliografia Principal:

1) E.R. Davidson and B. Feller Basis Set Selection in Molecular Calculations. Che. Rev. 1986. 2) A. Szabo e N.S. Ostlund. Modern Quantum Chemistry. Macmillan, 1982. 3) H.F. Schaefer III, The Development of Ab Initio Methods in Molecular Electronic Structure Theory. Oxford University Press, 1984.

8. Principais Docentes Responsáveis:

Lee Mu Tao

Luiz Carlos Gomides Freitas

9. Aprovação da Coordenação do Programa de Pós-Graduação:

Aprovada na 341a. reunião da coordenação deste programa de pós-graduação, realizada em 03/10/2007.

__/__/__

Assinatura do Coordenador do Programa

10. Aprovação do Centro:

Aprovada na 1a. reunião do Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia, realizada em 11/11/1111.

__/__/__

Assinatura do Diretor do Centro

11. Aprovação do Conselho de Pós-Graduação:

Aprovada na 325a. reunião da Câmara de Pós-Graduação, realizada em 28/11/2007.

__/__/__

Assinatura do Presidente do Conselho