



PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS

Disciplina	
Código	Nome
QF535	Introdução à Química Quântica

Vetor
OF:S-2 T:004 P:000 L:000 O:002 D:000 HS:006 SL:004 C:006 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req	F 328
---------	-------

Ementa
Evolução histórica da descrição da luz e da matéria. A antiga mecânica quântica, quantização da energia da radiação e mecânica. Os postulados da mecânica quântica ondulatória. Aplicações a sistemas simples. Química quântica: estruturas atômicas e estruturas moleculares de sistemas simples. Ensino de química quântica: atividades orientadas.

Programa
I. Aspectos históricos da física , descrição da luz e da estrutura da matéria anteriores à antiga física quântica. A evolução da teoria é conduzida pela evolução experimental. Alguns experimentos que as teorias não puderam modelar.
II. As fundações da antiga mecânica quântica , Planck, Einstein: a nova descrição da radiação eletromagnética; Bohr: a quantização da energia mecânica, estados estacionários, transições radiativas, um modelo quântico para o átomo de H Falhas, fraquezas e tentativas de correção do modelo de Bohr.
III. As fundações da moderna química quântica , De Broglie: dualidade, ondas de matéria e os experimentos que as detectaram; Heisenberg e a mecânica matricial; A mecânica ondulatória de Schroedinger; A existência do spin do elétron e sua ausência na teoria de Schroedinger; Dirac: a linearização da equação de onda, previsão e descoberta das antipartículas;
IV. Os postulados da mecânica quântica não relativística , Aplicações a sistemas simples uni e bidimensionais; O átomo de H segundo Schroedinger; Átomos multieletrônicos; Princípio de Exclusão de Pauli e suas consequências; Os primeiros trinta anos da mecânica quântica, uma visão integrada
V. Química Quântica – Os limites práticos da teoria e métodos para contorna-los; Hartree e a aproximação das partículas independentes; Fock: férmions e os átomos multieletrônicos; Correlação eletrônica; A molécula H_2^+ e a natureza da ligação química; Moléculas diatômicas e poliatômicas: o método CLAO; A química quântica ensinada no colégio: Estruturas de Lewis e seu contexto histórico. Pauling, hibridização e diagrama de ocupação orbital. Teoria da ligação de valência.

VI. **Atividades Orientadas:** O ensino da química quântica no colégio.

Bibliografia

1. D.A.McQuarrie and J.D.Simon, Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books; 1a. Edição (1997).
2. Sebera, D.K., Estrutura Eletrônica e Ligação Química, Ed. Polígono, 1a Edição(1968)
3. Giberti, A., Origens históricas da física moderna, Fundação Calouste Goulbekian, 1a Edição (1982)
4. Gamow, G., Thirty Years that Shook Physics: The Story of Quantum Theory, Dover, Reprint, (1985)
5. Hoffman, B.,The Strange Story of the Quantum, Dover, Reprint, (1985),

Critérios de Avaliação

Critérios de avaliação definidos pelo Professor, com base no disposto na Seção I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliação do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduação. Frequência: 75 % (* O abono de faltas será considerado dentro do previsto no capítulo VI, seção X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduação)