



PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS

Disciplina	
Código	Nome
QF536	Química Quântica

Vetor
OF:S-5 T:004 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:004 SL:004 C:004 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req
MA311 QI245 *F 328

Ementa
Postulados da Mecânica Quântica. Equação de Schroedinger. Soluções exatas e métodos de aproximação. Átomo de Hidrogênio e átomos multieletrônicos. Métodos de estruturas eletrônicas para sistemas moleculares.

Programa
<p>Aspectos Históricos. Propriedades de ondas: Comprimento de onda, número de onda; período, frequência, velocidade de propagação, amplitude. Equações fundamentais da antiga teoria quântica: Planck e De Broglie.</p> <p>I. Primeiro Postulado da Mecânica Quântica: Funções de Onda: Função de onda genérica estacionária e dependente do tempo. Densidade de probabilidade e probabilidade. Funções de onda normalizadas e não-normalizadas. Funções de onda bem comportadas: contínuas, unívocas e finitas.</p> <p>II. Segundo Postulado da Mecânica Quântica: Operadores. Operador de momento linear. Criando operadores a partir de conceitos clássicos: operador de energia potencial, cinética e hamiltoniano. Soma e multiplicação de operadores. Operadores lineares. Equação de autovalores. Operadores hermitianos e funções ortogonais.</p> <p>III. Alguns Teoremas Fundamentais. Ortogonalidade. Conjunto de Autofunções Ortonormais (Delta de Kronecker). Expansão numa base. Comutação. Princípio da Incerteza de Heisenberg. Comutação de dois operadores em um conjunto de autofunções. - Ortogonalidade. Comutadores e princípio da incerteza.</p> <p>IV. Terceiro postulado: Teorema do Valor Médio. Valores médios e probabilidade para valores discretos e contínuos. Autovalores e valores médios.</p> <p>V. Quarto Postulado: Equação de Schrödinger. Equação de Schrödinger dependente do tempo. Separação de variáveis. Equação de Schrödinger independente do tempo. Solução da equação diferencial dependente apenas do tempo. A função de onda global dependente do tempo.</p> <p>VI. Solução analítica da partícula na caixa unidimensional (1D). Reconhecendo o potencial. Construindo o hamiltoniano e a equação de Schrödinger. Solução analítica da equação diferencial: O uso de condições de contorno. Níveis de energia, função de onda: normalização e nós. Valor médio do operador de momento. Valor médio do operador posição: valor médio e valor mais provável.</p> <p>VII. Solução analítica da partícula na caixa bidimensional (2D). Construindo o hamiltoniano e a equação de Schrödinger. Separação de Variáveis. Degenerescência. Cálculo do valor médio para mais de uma coordenada.</p> <p>VIII. Solução analítica da partícula no anel. Movimento circular no plano xy, construção do operador de energia cinética: momento de inércia e momento angular. Sistema de coordenadas plano polar e transformação de coordenadas cartesianas (xy) e plano polares (r,). Solução da Eq. de Schrödinger e condições de contorno: quantização de energia, degenerescência, associação dos números quânticos com momento angular no eixo z.</p>

IX. Rotor Rígido. Rotor rígido com duas massas, centro de massa para dois corpos, mudanças da origem do sistema de coordenadas, representação da energia cinética de rotação em três dimensões: massa reduzida, momento de inércia e momento angular. Momento angular e construção do operador de momento angular em coordenadas cartesianas. Coordenadas esféricas polares e transformação de coordenadas do operador momento angular. Solução da equação de Schrödinger para o rotor rígido, separação de variáveis e quantização de energia. Funções de onda do rotor rígido: Funções associadas de Legendre e os harmônicos esféricos. Associação dos números quânticos com momento angular.

X. Oscilador Harmônico. Solução clássica do oscilador harmônico: frequência fundamental e constante de força. Solução da equação de Schrödinger para o oscilador harmônico envolvendo duas massas: A equação diferencial de Hermite e a quantização de energia.

XI. Princípio Variacional e Teoria de Perturbação.

XII. Átomo de H e Multieletrônicos.

XIII. Modelo de Hartree. Definição de spin-orbitais e função de onda como produto de Hartree utilizando spin-orbitais. Determinação do valor médio de energia eletrônica de um átomo multieletrônico empregando o produto de Hartree. Integração sobre as coordenadas de spin e o valor médio da energia em termos de funções orbitais. Uma dedução simplificada do método de Hartree: modelo de partículas independentes, funções spin-orbitais ortonormais, integrais de Coulomb e as equações de Hartree. Interpretação das equações de Hartree: modelo de campo médio e autoconsistente. Distribuições de férmions e bósons: simetria e anti-simetria da função de onda. Funções de onda para o átomo de He no estado fundamental e excitados.

XIV. Método de Hartree-Fock. Funções de Onda Anti-simétricas para muitos elétrons. Determinantes de Slater. Princípio de exclusão de Pauli.

XV. Teoria do Orbital Molecular.

Bibliografia

1. McQuarrie, D. A.; Simon, J. D. Physical chemistry: a molecular approach; University Science Books: McGuire, Ann Editor, 1997.
2. Chandra, A. K. Introductory quantum chemistry; Tata McGraw-Hill, 1994.
3. Levine, I. N. Quantum Chemistry; volume I Academic Press: New York, 1993.
4. McWeeny, R.; Sutcliffe, B. T. Methods of Molecular Quantum Chemistry; Academic Press: London, 1969.
5. Szabo, A.; Ostlund, N. S. Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory; MacMillan Publishing Co., Inc.: 866 Third Av., New York, N. Y., 10022, 1982.
6. D.A.McQuarrie and J.D.Simon, Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books; 1a. edição (1997).
7. Oswaldo Sala, Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho; Ed.Unesp, 1ª. Edição (1996).
8. G. N. Barrow, Introduction to Molecular Spectroscopy; McGraw-Hill Education, (1962).

Crerios de Avaliao

Crerios de avaliao definidos pelo Professor, com base no disposto na Seo I – Normas Gerais, Capitulo V – Da Avaliao do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduao. Frequencia: 75 % (* O abono de faltas ser considerado dentro do previsto no capitulo VI, seo X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduao)