



**1º Semestre 2022**

<b>Disciplina</b>	
<b>Código</b>	<b>Nome</b>
QF536	Química Quântica

<b>Turmas</b>	<b>Horários</b>	<b>Local</b>
A	Seg: 08/10 Qua: 08/10	IQ02 IQ02

**Docentes**

Colocar nome, e-mail e local para contato

**Disciplinas do 1S/2022**

A condução das disciplinas do 1S/2022 está normatizada pela **GR 74/2021** que estabelece em seu **Art. 1º** - As aulas teóricas e práticas do 1º semestre de 2022 serão presenciais, sendo que as aulas teóricas deverão ser realizadas com até 100% da lotação estabelecida da sala de aula, caso não haja restrições sanitárias e no **§1º do Art. 1º**. - As condições sanitárias serão orientadas pelo Comitê Científico de Contingência do Coronavírus da Unicamp previamente ao começo do semestre.

**Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações**

Descrição: Aulas expositivas e presenciais. Duas avaliações (P1 e P2), a primeira no final do mês de Abril e a segunda no final do mês de período letivo.

**Prazos de Entrega das Atividades e dos Resultados das Avaliações**

Descrição: Tão logo quanto possível após a realização das avaliações.

**Critérios de Avaliação e Aprovação**

Descrição detalhada do método para o cálculo da média parcial e da nota final (que combine a média parcial e nota do exame)

A média parcial será considerada média ponderada de P1 e P2, sendo que os pesos são 1 e 2, respectivamente. Média das provas igual ou maior que 5, aprovado. Média das provas menor que 2,5, reprovado, e igual ou maior que 2,5 e menor que 5, exame. A nota final será a média aritmética entre a média parcial e a nota no exame. Sendo essa igual ou maior que 5, aluno aprovado. Caso contrário, reprovado.

**Forma de Atendimento Extra-Classe**

Descrição: Disponibilidade durante o expediente.

P1 = 27 de Abril  
P2 = 12 de Julho  
Exame = 25 de Julho

**Outras informações relevantes**

Nada a acrescentar.

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
INSTITUTO DE QUÍMICA



**PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS**

Disciplina	
Código	Nome
QF536	Química Quântica

<b>Vetor</b>
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%

<b>Pré-Req</b>	MA311 QI245 *F 328
----------------	--------------------

<b>Ementa</b>
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.

<b>Programa</b>
<p><b>Aspectos Históricos. Propriedades de ondas:</b> Comprimento de onda, número de onda; período, frequência, velocidade de propagação, amplitude. <b>Equações fundamentais da antiga teoria quântica: Planck e De Broglie.</b></p> <p><b>I. Primeiro Postulado da Mecânica Quântica: Funções de Onda:</b> 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><b>II. Segundo Postulado da Mecânica Quântica: Operadores.</b> 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><b>III. Alguns Teoremas Fundamentais.</b> 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><b>IV. Terceiro postulado: Teorema do Valor Médio.</b> Valores médios e probabilidade para valores discretos e contínuos. Autovalores e valores médios.</p> <p><b>V. Quarto Postulado: Equação de Schrödinger.</b> 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><b>VI. Solução analítica da partícula na caixa unidimensional (1D).</b> 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><b>VII. Solução analítica da partícula na caixa bidimensional (2D).</b> Construindo o hamiltoniano e a equação de Schrödinger. Separação de Variáveis. Degenerescência. Cálculo do valor médio para mais de uma coordenada.</p> <p><b>VIII. Solução analítica da partícula no anel.</b> 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, <math>\theta</math>). 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 e 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).

#### 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)