

Código: QF535								
Nome: Introdução à Química Quântica								
Nome em Inglês: Introduction to Quantum Chemistry								
Nome em Espanhol: Introducción a la Química Cuántica								
Tipo de Disciplina: Semanal								
Tipo de Aprovação: Nota e Frequência								
Característica: Regular								
Frequência: 75%								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: Semestral / 2º Período - períodos pares								
Exige Exame: Sim								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
4	-	-	2	-	-	4	15	6
Ocorrência nos Currículos: 05, 56								
Pré-requisitos: F 328								
<p>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.</p>								
<p>Programa:</p> <p>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.</p> <p>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</p> <p>Falhas, fraquezas e tentativas de correção do modelo de Bohr.</p> <p>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;</p> <p>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.</p> <p>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 H₂ + 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.</p> <p>VI. Atividades Orientadas: O ensino da química quântica no colégio.</p>								

Bibliografia Básica

- 1) MCQUARRIE, D. A.; SIMON, J. D.; **Physical Chemistry: A Molecular Approach**; University Science Books, New York (1997).
- 2) LEVINE, I. N.; **Physical Chemistry**; McGraw Hill, New York, 6a ed. (2008)
- 3) MARTINS, R. A.; ROSA, P. S.; **História da Teoria Quântica**; Editora Livraria da Física, São Paulo (2014).

Bibliografia Complementar

- 1) GIBERTI, A.; **Origens Históricas da Física Moderna**, Fundação Calouste Goulbekian, São Paulo (1982)
- 2) GAMOW, G.; **Thirty Years that Shook Physics: The Story of Quantum Theory**, Dover, New York (1985)
- 3) HOFFMAN, B.; **The Strange Story of the Quantum**, Dover, New York (1985),
- 4) FEYNMAN, R.; **A Estranha Teoria da Luz e da Matéria**, Editora Senai, São Paulo (2018).
- 5) PIZA, A. F. R. T; **Schrödinger & Heisenberg: A Física Além do Senso Comum**; Odysseus Ed., 2ª ed., São Paulo (2007).
- 6) VALADARES, E. C. **Newton, A Órbita da Terra em um Copo D'água**; Odysseus Ed., São Paulo (2007).
- 7) GAVROGLU, K.; SIMÕES, A.; **Neither Physics Nor Chemistry: A History of Quantum Chemistry**, MIT Press, New York (2011).