

Código: <b>QF536</b>								
Nome: <b>Química Quântica</b>								
Nome em Inglês: <b>Quantum Chemistry</b>								
Nome em Espanhol: <b>Química Cuántica</b>								
Tipo de Disciplina: <b>Semanal</b>								
Tipo de Aprovação: <b>Nota e Frequência</b>								
Característica: <b>Regular</b>								
Frequência: <b>75%</b>								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: <b>Semestral / Todos os períodos</b>								
Exige Exame: <b>Sim</b>								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
<b>4</b>	-	-	-	-	-	<b>4</b>	<b>15</b>	<b>4</b>
Ocorrência nos Currículos: <b>05</b>								
Pré-requisitos: <b>*MA311</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>								
<p>Programa:</p> <p><b>Aspectos Históricos. Propriedades de ondas:</b> Comprimento de onda, número de onda; período, frequência, velocidade de propagação, amplitude. Equações fundamentais da antiga teoria quântica: Planck e De Broglie.</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. Ortogonalidade.</b> 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,). Solução da Eq. de Schrödinger e</p>								

condições de contorno: quantização de energia, degenerescência, associação dos números quânticos com momento angular no eixo z.

**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 Básica**

- 1) MCQUARRIE, D. A.; SIMON, J. D.; **“Physical Chemistry: A Molecular Approach”**; University Science Books, New York, 1997, 1360 p.
- 3) SALA, O.; **“Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho”**; 2ª ed., Ed. Unesp, 2011, 280 p.
- 3) BRAGA, J. P.; **“Fundamentos de Química Quântica”**; Editora UFV; Viçosa, 2007, 272 p.

#### **Bibliografia Complementar**

- 1) LEVINE, I. N.; **“Quantum Chemistry”**; 5a ed., Pearson, New York, 1999, 739 p.
- 2) BARROW, G. N.; **“Introduction to Molecular Spectroscopy”**; New York, McGraw-Hill Education, 1962, 318 p.
- 3) CHANDRA, A. K.; **“Introductory Quantum Chemistry”**; Tata McGraw-Hill, New York, 1994, 390 p.
- 4) LEVINE, I. N.; **“Physical Chemistry”**; 6a ed., McGraw Hill, New York, 2008, 1008 p.
- 5) DEMTRÖDER, W.; **“Atoms, Molecules and Photons: An Introduction to Atomic-, Molecular- And Quantum Physics”**; 2a ed., Springer, New York, 2010, 589 p.