



**PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA**

**2º Semestre - 2020**

Disciplina	
Código	Nome
QF536	Química Quântica

Turmas	Horário	Local
A	Seg. 8-10, Qua. 8-10.	Condução Remota

**Docentes**

Leandro Martínez - lmartine@unicamp.br - Sala H312

**Disciplinas Teóricas – Plano de Ação IQ 2S/2020**

As disciplinas teóricas do 2S/2020, em virtude da pandemia de COVID-19 e da necessidade de manutenção de distanciamento social, serão conduzidas integralmente de forma remota e mediada por tecnologia, **incluindo os processos avaliativos.**

**Forma de Condução das Aulas Remotas Mediadas por Tecnologia**

- Aulas online síncronas (ao vivo)  
 Aulas Gravadas  
 Aulas online ao vivo + disponibilização da gravação da aula

Descrição: Pretende-se gravar o curso inteiro na forma de aulas teóricas, que serão transmitidas aos alunos nos horários das aulas, com acompanhamento do docente para comentários, dúvidas, etc.

**Forma de Atendimento às Dúvidas das Aulas Remotas**

Descrição: O docente estará disponível para tirar dúvidas online no horário das aulas e, se for necessário, em horários adicionais mediante requisição por parte dos estudantes.

**Plataforma Virtual que se pretende utilizar**

- Google Classroom + Google Meet  
 Moodle

Outra (especificar):

**Forma de Condução das Avaliações e Prazos de Entrega**

Descrição: Descrição: A disciplina contará com duas provas online, que deverão ser feitas no horário da aula, no GoogleClassroom. Ainda, contará com uma lista de exercícios que deverá ser entregue feita à mão (escaneada, se for o caso, ou fisicamente, se possível). A nota da disciplina será a média aritmética das duas provas (cada uma valendo entre 0 e 10), multiplicada pela nota da lista. A nota da lista variará entre 0 e 1, sendo que o aluno perde 0,1 ponto para cada exercício que não foi entregue. A lista deve ser entregue integralmente no dia da realização da segunda avaliação. Finalmente, a disciplina contará com um exame de recuperação final.

O exame poderá ser usado como prova substitutiva de uma das provas caso o aluno apresente uma justificativa válida para o não comparecimento. Se o aluno faltar nas duas provas, uma das notas será zero.

#### **Critérios de Avaliação e Aprovação**

Descrição: Alunos com média final (média aritmética das notas das provas multiplicada pela nota da lista) maior ou igual a 5,0 serão aprovados. Alunos com média menor que 5,0 deverão fazer o exame final. A nota final da disciplina será a média aritmética da nota média final e da nota do exame. Alunos com nota final maior ou igual a 5,0 serão aprovados, e aqueles com nota final menor que 5,0 serão reprovados.

#### **Calendário – Disciplinas Teórica**

(incluir a data de todas as atividades avaliativas, inclusive exame)

16/09 - Início das aulas

09/11 - Prova 1

13/01 - Prova 2 (Data final para entrega da lista de exercícios)

25/01 - Exame final

12/10 – Não haverá atividades

21 a 23/10 – Congresso de Iniciação Científica (no período em que estiver sendo realizado o congresso os alunos que participarem do evento estarão dispensados das aulas.)

28/10 – Não haverá atividades

02/11 – Não haverá atividades

23 a 27/11 – Semana da Química Virtual – Não haverá aula, sendo considerado dia letivo.

25/11 – Reunião de Avaliação de Curso

07 e 08/12 – Não haverá atividades

24 a 31/12 – Não haverá atividades (recesso).

19/01 – Término das Aulas do 2S/2020

20 a 26/01 – Semana de Exames Finais do 2S/2020

#### **Outras informações relevantes**

**Notas, exercícios e informações adicionais:** <http://m3g.iqm.unicamp.br>, no link “Material Didático”.

**SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA**



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><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 <math>xy</math>, construção do operador de energia cinética: momento de inércia e momento angular. Sistema de coordenadas plano polar e transformação de coordenadas cartesianas (<math>xy</math>) e plano polares (<math>r, \theta</math>). Solução da Eq. de Schrödinger e condições de contorno: quantização de energia, degenerescência, associação dos números quânticos com momento angular no eixo <math>z</math>.</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).

#### Crítérios de Avaliação

Crítérios 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)