



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>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, θ). 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).

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)