



**PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA**

**1º Semestre 2021**

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

<b>Turmas</b>	<b>Horário</b>	<b>Local</b>
A	Segunda-feira, 8h às 10h	Remoto
A	Quarta-feira, 8h às 10h	Remoto

**Docentes**

Rogério Custodio, rogerct@unicamp.br e Sala H318.

**Disciplinas Teóricas – Plano de Ação IQ 1S/2021**

As disciplinas teóricas do 1S/2021, 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**. Qualquer alteração na forma de condução da disciplina será informada com a devida antecedência.

**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:

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

Descrição: Disponibilidade por e-mail ou via Google Meet em tempo integral para dúvidas sobre conteúdo ministrado nas aulas e/ou exercícios

**Plataforma Virtual que se pretende utilizar**

- Google Classroom + Google Meet  
 Moodle

Outra (especificar):

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

Descrição: Qualquer avaliação terá um prazo de 24 horas para ser devolvido pelos alunos. A prova sobre todo o conteúdo da disciplina corresponderá a 50% da média. A média de testes periódicos corresponderão a 50% da média.

**Critérios de Avaliação e Aprovação**

- 1) Descrição: Será realizada uma (1) prova sobre todo o conteúdo da disciplina no final do semestre. Esta prova corresponderá a 50% da média.
- 2) Também serão aplicados quatro (4) testes periodicamente contendo exercícios ou perguntas sobre o conteúdo previamente apresentado ou a ser estudado pelos alunos.

A média M será determinada por:  $M = (P1 + MTest)/2$ , sendo P1 a nota da prova e MTest a média simples das notas dos testes.

Média M maior ou igual a cinco (5), o aluno está aprovado. Média menor do que cinco (5), o aluno fará exame. A média final (MF) em caso de exame será a média simples entre a média M atingida durante o semestre e a nota do exame (Ex), ou seja:  $MF = (M + Ex)/2$ . Média final MF maior ou igual a cinco (5), o aluno está aprovado.

Será dada prova ou teste substitutivo nos casos previstos no regimento. Casos não previstos no regimento, poderão ser avaliados e eventualmente a nota do próprio exame poderá ser considerada como nota de prova ou teste substitutivo de uma das atividades.

<b>Calendário – Disciplinas Teóricas</b>	
<b>Data</b>	<b>Atividade</b>
<b>05/04/2021</b>	<b>1º teste</b>
<b>28/04/2021</b>	<b>2º teste</b>
<b>19/05/2021</b>	<b>3º teste</b>
<b>21/06/2021</b>	<b>4º teste</b>
<b>07/07/2021</b>	<b>Prova</b>
<b>21/07/2021</b>	<b>Exame</b>
<p>01 a 03/04 – Não haverá atividades            21/04 - Não haverá atividades            01/05 - Não haverá atividades            24/05 - Reunião de Avaliação de Curso – Não haverá atividades            03 a 05/06 - Não haverá atividades            09 e 10/07 - Não haverá atividades            17/07 - Término das Aulas            19 a 24/07 - Semana de Exames Finais</p>	

#### **Outras informações relevantes**

Os testes serão aplicados após o horário das aulas em que foram marcados e sua entrega terá um prazo de 24 horas, não interferindo com o horário de aula.

Todo material apresentado durante as aulas (slides, anotações de aula pelo docente, programa da disciplina e outros dados) será disponibilizado no Google Classroom.

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 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 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).

#### 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)