



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE QUÍMICA
CURSO DE QUÍMICA INDUSTRIAL

FICHA DE DISCIPLINA

DISCIPLINA: QUÍMICA QUÂNTICA

CÓDIGO: QQB046

UNIDADE ACADÊMICA: INSTITUTO DE QUÍMICA

PERÍODO: Sétimo

CH TOTAL
TEÓRICA:

CH TOTAL
PRÁTICA:

CH TOTAL:

OBRIGATÓRIA: (X) OPTATIVA: ()

45

00

45

OBS:

PRÉ-REQUISITOS:

CÓ-REQUISITOS:

OBJETIVOS

Introduzir ao aluno as bases da Mecânica Quântica, sobretudo no que concerne à Química Quântica; Familiarizar o aluno com os métodos da Química Quântica, e sua aplicação na previsão de propriedades, e no tratamento de problemas químicos.

EMENTA

Equação de Schroedinger: dependente e independente do tempo. A equação de Schroedinger como uma equação de autovalores. Operadores. Valores médios. Modelos da partícula livre e partícula na caixa (uma, duas e três dimensões): aplicações. Transições eletrônicas. Modelo do Oscilador Harmônico. Noções sobre oscilador anarmônico: vibrações em moléculas. Transições Vibracionais. Modelo do Rotor Rígido. Transições Rotacionais. Átomos Hidrogenóides. Átomos multieletrônicos: Operador Hamiltoniano. Princípio da exclusão de Pauli, Indistinguibilidade, Spin eletrônico, Princípio da Estruturação, Blindagem. Representação de Funções de Onda. Moléculas. O Método Variacional. Funções Variacionais Lineares. Métodos Aproximados. O método de Hückel simples. Métodos semi-empíricos e ab initio: diferenças, principais qualidades e limitações. Noções da Teoria do Funcional de Densidade. Aplicações da Mecânica Quântica: Otimização de estruturas, Previsão de propriedades termodinâmicas e eletrônicas; Previsão de espectros vibracional, eletrônico e de ressonância magnética nuclear.

DESCRIÇÃO DO PROGRAMA

1. Desenvolvimento da Equação de Schroedinger: As equações de Schroedinger Dependente e Independente do Tempo;
2. Equação de Schroedinger como uma equação de autovalores; Operadores; Valores Médios;
3. Modelos: partícula livre e partícula na caixa (uma e três dimensões). Degenerescência. Aplicações a sistemas atômicos e moléculas. Energias de Transição. Modelo elétron livre;
4. Oscilador Harmônico e Anarmônico: vibrações em moléculas;
5. Rotor rígido. Transições rotacionais;
6. Átomos Hidrogenóides: Aplicação da equação de Schroedinger ao átomo de hidrogênio; Estrutura eletrônica: números quânticos, orbitais, degenerescência; Efeito Zeeman;
7. Átomos multieletrônicos: Dificuldades inerentes à aplicação da Equação de Schroedinger a sistemas multieletrônicos; Spin eletrônico – indistinguibilidade e antisimetria: determinantes de Slater; Princípio de Pauli; Princípio da Estruturação; Blindagem;
8. Moléculas: Dificuldades inerentes à aplicação da Equação de Schroedinger a sistemas moleculares. Princípio de Born-Oppenheimer. Métodos aproximados: O método Variacional. Funções Variacionais Lineares. O Determinante Secular. Método de Hückel simples. Método C.L.O.A. de Roothaan.
9. Métodos Semi-Empíricos, Ab Initio e da Teoria do Funcional de Densidade: Otimização de Estruturas; Previsão de propriedades moleculares; estrutura eletrônica; termodinâmicas e eletrônicas; Obtenção de parâmetros espectroscópicos.

BIBLIOGRAFIA

BÁSICA:

ATKINS, P. W., Físico-Química, vol. 1 – 6ª Edição, Trad.: H. Macedo, Rio de Janeiro: LTC, 1997, e vol. 1, 8ª Ed., Trad.: E. Clemente, M. J. E. de Mello Cardoso; O. E. Barcia, Rio de Janeiro: LTC, 2008.

LEVINE, I. N., Quantum Chemistry, 4ª edição, Prentice Hall, USA, 1991; 5ª ed., Prentice Hall, USA, 2000.

EISBERG, R. & RESNICK, R. Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas. Trad. de Paulo Costa Ribeiro *et al.*, 9ª ed., Rio de Janeiro, Campus, 1994.

COMPLEMENTAR:

CUSTÓDIO, R., GOMES, A. S., MARTINS, L. R. Postulados da Mecânica Quântica. Chemkeys, Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Química, Campinas, mar. 2000. Disponível em: <http://chemkeys.com/br/2000/03/24/postulados-da-mecanica-quantica/>. Acesso em: 25 mar. 2011.

CUSTÓDIO, R., MORGON, N. H., DE ANDRADE, J. C. Método LCAO. Chemkeys, Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Química, Campinas, mar. 2000. Disponível em: <http://chemkeys.com/br/2000/03/18/metodo-lcao/>. Acesso em: 25 mar. 2011.

MORGON, N. H., CUSTÓDIO, R. Funções de Base: O Ajuste Variacional. Chemkeys, Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Química, Campinas, mar. 2000. Disponível em: <http://chemkeys.com/br/2001/02/18/funcoes-de-base-o-ajuste-variacional/>. Acesso em: 25 mar. 2011.

APROVAÇÃO

03/12/2010

Universidade Federal de Uberlândia
Coordenação do Curso de Química Industrial

Wellington de Oliveira Cruz
Coordenador

Portaria R nº 715/10

Prof. Dr. Wellington de Oliveira Cruz

Coordenador do Curso de Química Industrial

Portaria R nº 715/10

03/12/2010

Universidade Federal de Uberlândia

Prof. Manuel González Hernández Terrones

Prof. Dr. Manuel González Hernández Terrones

Depto de Instituto de Química

Portaria R nº 473/2006