



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE QUÍMICA
CURSO DE LICENCIATURA EM QUÍMICA

FICHA DE DISCIPLINA

DISCIPLINA: QUÍMICA QUÂNTICA

CÓDIGO: GQL061	UNIDADE ACADÊMICA: INSTITUTO DE QUÍMICA		
PERÍODO:	CH TOTAL TEÓRICA: 30	CH TOTAL PRÁTICA: 00	CH TOTAL: 30
OBRIGATÓRIA: ()	OPTATIVA: (X)		

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

- MCQUARRIE, D.A., SIMON, J.D., *Physical Chemistry. A Molecular Approach*, University Science Books, California, 1997;
- LEVINE, I. N., *Quantum Chemistry*, 4^a edição, Prentice Hall, USA, 1991
- ATKINS, P.W., *Físico-Química*, vol. 2 – 6^a Edição, Livros Técnicos e Cient., Brasil, 1999
- HIRST, D.M. *A Computational Approach to Chemistry*, Blackwell Scientific Publications, England, 1990
- CAFFERY, M.I., DOBOSH, P.A., RICHARDSON, D.M., *Laboratory Exercises using Hyperchemistry – Tutorials for Molecular Modelling*, Hypercube, 1998.
- HEHRE, W. J., YU, J., KLUNZINGER, P. E., LOU, L., *A Brief Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations*, Wavefunction, Inc., USA, 1998.
- FORESMAN, J.B., FRISCH, A.E., *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods* 2^a Edição, Gaussian, Inc., USA, 1996.
- *Gaussian 94 User's Reference, Revision D.1 and higher*, Gaussian, Inc., USA, 1996.
- *Gaussian 98 User's Reference, Version 5.4*, Gaussian, Inc., USA, 1999.
- *Ampac 6.56PC Manual*, Semichem, Inc., USA, 1997.
- *Hyperchem 5.11 Pro Manual*, Hypercube, Inc., USA, 1996.

APROVAÇÃO

18/08/2007


Profª Drª Maria Lúcia Bento
Coordenadora do Curso de Química
Portaria R nº 897/2006

18/08/2007


Prof. Dr. Manuel Gonzalo Hernandez Terrones
Diretor do Instituto de Química
Portaria R nº 473/2006