

## Química Quântica

Créditos: 04

Carga Horária: 60 horas

**Ementa:** Equação de Schrödinger Independente do Tempo. Equação de Schrödinger Dependente do Tempo. Teoremas da Mecânica Quântica. Momento Angular. Átomo de Hidrogênio; Solução Exata da Equação de Schrödinger para Átomos Hidrogenóides. Soluções Aproximadas para a Equação de Schrödinger. Átomos Multi-Eletrônicos; Princípio da Exclusão de Pauli; Função de Onda Antissimétrica: Determinantes de Slater. Separação Born-Oppenheimer: Moléculas Diatômicas; Moléculas Poliatômicas. Estrutura Eletrônica de Moléculas Diatômicas; Estrutura Eletrônica de Moléculas Poliatômicas; Orbitais Moleculares; Teoria da Ligação da Valência. Modelo de Hartree-Fock aplicado a Moléculas Poliatômicas; Cálculos de Química Quântica; Métodos *Ab-Initio*; Métodos Semi-Empíricos.

### Programa:

#### 1. Equação de Schrödinger

- Operadores
- Autovalores e Autovetores
- Função de onda
- Equação de Schrödinger independente do Tempo
- Equação de Schrödinger dependente do Tempo
- Partícula Livre
- Partícula na Caixa
- Oscilador Harmônico

#### 2. Teoremas da mecânica quântica

- Operadores Hermitianos
- Postulados da Mecânica Quântica

#### 3. Momento angular

- Operadores de Momento Angular: Propriedades
- Autovalores e Autovetores do Momento Angular
- Momento Angular de Spin

#### 4. Átomo de Hidrogênio

- Rotor Rígido
- Solução Exata da Equação de Schrödinger para Átomos Hidrogenóides
- Orbitais Atômicos
- Níveis de Energia

#### 5. Soluções Aproximadas para a Equação de Schrödinger

- Método Variacional
- Determinante Secular
- Teoria de Perturbação para Estados Não-Degenerados
- Teoria de Perturbação para Estados Degenerados
- Teoria de Perturbação Dependente do Tempo
- Interação da Radiação com a Matéria

## 6. Átomos Multi-Eletrônicos

- O Átomo de Hélio
- Princípio da Exclusão de Pauli
- Função de Onda Antissimétrica: Determinantes de Slater
- Átomos Multi-Eletrônicos
- Estados Multi-Eletrônicos
- Interação Spin-Órbita
- Termos Espectroscópicos
- Solução Matricial da Equação de Hartree-Fock

## 7. Moléculas Diatômicas

- Separação Born-Oppenheimer
- Movimento Nuclear em Moléculas Diatômicas
- Rotação e Vibração
- Moléculas Poliatômicas

## 8. Estrutura Eletrônica de Moléculas Diatômicas

- Orbitais Moleculares – LCAO
- Teoria da Ligação da Valência
- Comparação entre as Teorias MO e VB
- Ligação Química

## 9. Moléculas Poliatômicas

- Modelo de Hartree-Fock aplicado a Moléculas Poliatômicas
- Cálculos de Química Quântica
- Métodos *Ab-Initio*
- Métodos Semi-Empíricos
- Propriedades Moleculares

## Referências Bibliográficas:

- Simons, J.; e Nichols, J., **Quantum Mechanics in Chemistry**, Oxford University Press Inc., New York, 1997.
- Levine, I. N., **Quantum Chemistry**, Prentice-Hall International Inc., 4<sup>a</sup> Ed., New Jersey, 1991.
- Pilar, Frank L., **Elementary Quantum Chemistry**, Dover Publications, New York, 2001.
- Szabo, A; Ostlund, N. S., **Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory**, Dover Publications, New York, 1989.
- Jensen, F., **Introduction to Computational Chemistry**, John Wiley & Sons, New York, 2002.
- Cramer, C.J., **Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models**, 2<sup>a</sup> ed., John Wiley & Sons, New York, 2002.
- Artigos recentes da literatura.