



## PROGRAMA DE DISCIPLINA Físico-Química Avançada

### INFORMAÇÕES GERAIS

<b>Código da disciplina:</b> CET 517	<b>Créditos:</b> 03	<b>Carga Horária:</b> 45 horas-aula	<b>Tipo:</b> Obrigatória / Optativa
<b>Ano/Semestre:</b> 2019/2º		<b>Período:</b> 2º	<b>Código da turma:</b> QAV62
<b>Professor:</b> Daniel Augusto Barra de Oliveira		<b>Matrícula:</b> 2071680	

### 1 EMENTA

Teoria quântica aplicada ao conhecimento da estrutura e espectros atômicos. Teoria do Orbital Molecular. Espectroscopia vibracional e rotacional. Transições eletrônicas.

### 2 OBJETIVOS

#### 2.1 Geral:

Descrever a estrutura física dos átomos através dos princípios e métodos da teoria quântica. Equação de Schroedinger aplicada ao movimento vibracional, rotacional e translacional e a origem dos espectros eletrônicos. O método variacional. Resolução da equação de Schroedinger para o átomo de hidrogênio e a origem dos orbitais atômicos. Fundamentos e aplicações quantitativas da Teoria do Orbital Molecular. Noções elementares de energia de partição.

#### 2.2 Específicos:

Entendimento dos fenômenos químicos a luz da teoria quântica.

### 3 CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

- Aula 1- Os fundamentos da Mecânica Quântica**
- Aula 2- Operadores da Mecânica Quântica**
- Aula 3 Os postulados da Mecânica Quântica**
- Aula 4- Equação de Schroedinger**
- Aula 5- Movimento Linear**
- Aula 6- Oscilador Harmônico**
- Aula 7- Movimento Translacional**
- Aula 8- Momento Angular**
- Aula 9- Átomo de Hidrogênio**
- Aula 10- Método Variacional**
- Aula 11- O átomo de Hélio e o problema de muitos corpos**
- Aula 12 Teoria do orbital molecular**
- Aula 13- Teoria do Orbital Molecular para moléculas poliatômicas**
- Aula 14- Método do campo auto consistente**
- Aula 15- Método de Hartree-Fock**
- Aula 16- Prova**

**Observação: O conteúdo programático poderá sofrer eventuais mudanças na ordem de aulas a depender da turma ou de eventos externos. (Greves, feriados,..., etc)**

#### **4 METODOLOGIA**

1 Ensino:

Aulas expositivas usando Datashow associada à leitura de livros clássicos de grandes pensadores.

2 Avaliação:

A avaliação consistirá de duas provas escritas. A média para aprovação do discente será 7 ou >7. O aluno que não lograr êxito nas duas avaliações citadas, terá direito a realização do exame caso obtenha nota igual ou superior a 4. Toda e qualquer problema inerente a perda de provas deverá ser resolvido via protocolo com justificativa.

#### **5 BIBLIOGRAFIA**

5.1 Básica:

ATKINS, P. W.. Physical Chemistry. W. H. Freeman & Company, New York, 5th Ed., 1994.  
DIAS, J. J. C. T.. Química Quântica-Fundamentos e Métodos. Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1982.  
PESSOA Jr, O.. Conceitos de Física Quântica. 1a Ed.; Livraria da Física: Vols. 1 e 2, 2003

5.2 Complementar:

LEVINE, I. Quantum Chemistry. 4th Ed., Prentice Hall, 1991.

EISBERG, R. M., RESNICK, R.. Tradução: Enio Frota da Silveira. Física quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas. Tradução de Paulo Costa Ribeiro. Rio de Janeiro: Campus, 1979.

ATKINS, P., Físico-Química: Fundamentos. 3 Ed.; LTC: 2003.

---

Nome do Professor(a)  
Matrícula 2071680