

UFSJ

Universidade Federal  
de São João del-ReiCOORDENADORIA DO CURSO DE FÍSICA  
PLANO DE ENSINO

UNIDADE CURRICULAR: Tópicos de Mecânica Quântica para átomos e moléculas

PERÍODO: ESPECIAL

CURRÍCULO: 2019

DOCENTE: Ana Cláudia Monteiro Carvalho

DEPARTAMENTO: DCNAT

PRÉ-REQUISITO: FA em Cálculo Diferencial e Integral I e Fundamentos de Mecânica Clássica

CO-REQUISITO: -

## CARGA HORÁRIA

Carga Horária Total: 72 ha – 66 h

Carga Horária Prática: 54 ha – 50 h

Carga Horária Teórica: 18 ha – 16 h

GRAU: Licenciatura/Bacharelado

ANO: 2019

SEMESTRE: 1º

## EMENTA

Energia na mecânica clássica e na mecânica quântica. Problemas da mecânica quântica: oscilador harmônico e átomo de hidrogênio. Método Hartree-Fock. Teoria do Funcional de Densidade (DFT). Aplicações.

## OBJETIVOS

Estudar os conceitos fundamentais das teorias Hartree-Fock e Funcional de Densidade e aplicá-las no cálculo de estrutura e propriedades de átomos e moléculas pequenas.

## CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

## 1. Revisão de Mecânica Quântica

- 1.1 Revisão dos fundamentos da mecânica quântica
- 1.2 A equação de energia na mecânica clássica e na mecânica quântica
- 1.3 Resolução de problemas: partícula livre e poço de potencial
- 1.4 Movimento linear e o oscilador harmônico
- 1.5 Movimento rotacional e o átomo de hidrogênio

## 2. Método Hartree-Fock

- 2.1 Método variacional e o Oscilador Harmônico
- 2.2 Aproximação de Born-Openheimer
- 2.3 Discutindo Hartree-Fock-Roothaan com o átomo de hélio

## 3. Teoria do Funcional de Densidade

- 3.1 HF e DFT diferenças e semelhanças
- 3.2 Introdução ao teorema Hohenberg-Kohn e às equações de Kohn-Sham

## 4. Cálculo de estrutura e propriedades de pequenas moléculas

- 4.1 Introdução aos programas de cálculo de geometria e estrutura eletrônica
- 4.2 Cálculo para pequenas moléculas como  $C_6H_6$ ,  $C_2H_2$ ,  $C_2H_4$ , entre outras

## METODOLOGIA E RECURSOS AUXILIARES

Aulas expositivas presenciais onde serão discutidos os conceitos de física. Atividades individuais e em grupo (listas de exercício, atividades com simuladores e leituras complementares) poderão ser realizadas tanto em sala de aula como extraclasse. Essas atividades, poderão ser disponibilizadas no Portal Didático. De acordo com o projeto pedagógico do Curso, e havendo a necessidade, poderão ser utilizadas até 20% da carga didática em atividades não presenciais. Haverá horário de atendimento extraclasse a ser combinado com os alunos.

## AVALIAÇÃO

Serão atribuídas notas para Exercícios Extra-classe individuais (NExe), Trabalhos em Grupo (NTrab) e Seminários (NSem) – desenvolvidos ao longo do curso.

$$NExe_{Total} = \frac{\sum_{i=1}^n NExe_i}{n}$$

$$NTrab_{Total} = \frac{\sum_{i=1}^n NTrab_i}{n}$$

$$NSem_{Total} = \frac{\sum_{i=1}^n NSem_i}{n}$$

onde n é o número total de atividades e sendo NExe, NTrab e NSem avaliados em 10 pontos.

A nota final ( $N_{Final}$ ) será calculada a considerando a seguinte fórmula (estes serão os valores disponibilizados no Diário da Graduação):

$$N_{Final} = 0,34 \times N_{Exe_{Total}} + 0,33 \times N_{Trab_{Total}} + 0,33 \times N_{Sem_{Total}}$$

Será considerado aprovado o aluno que obtiver  $N_{final} \geq 6$  e frequência  $\geq 75\%$  ((Resolução nº 12, 04/04/2018 – CONEP/UFSJ).

Se  $N_{final} < 6$ , o aluno terá direito a fazer uma prova que substituirá a menor  $N_i$  ( $N_1$  ou  $N_2$  ou  $N_3$ ), caso o resultado da substitutiva for superior à uma das  $N_i$ s (Resolução nº 12, 04/04/2018 – CONEP/UFSJ - Art. 19). Se a frequência for inferior a 75% o aluno não terá direito à prova substitutiva. O conteúdo da prova substitutiva compreende toda a matéria do semestre.

Se a frequência do aluno for inferior a 75%, independentemente do valor de  $N_{final}$ , o aluno será considerado reprovado (Resolução nº 12, 04/04/2018 – CONEP/UFSJ - Art. 15, §1º).

#### BIBLIOGRAFIA BÁSICA

ATKINS, P.; FRIEDMAN, R. Molecular Quantum Mechanics, 5ª ed. Oxford: Oxford University, 2012.

SZABO, A.; OSTLUND, N.S. Modern Quantum Chemistry, Mineola: Dover, 2008.

GRIFFITS, D.J. Mecânica Quântica. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2011.

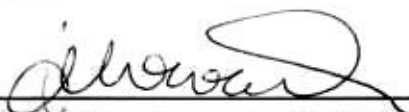
#### BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

EISBERG, R.; RESNICK, R. Física Quântica: átomos, moléculas...; 18ª ed. Rio de Janeiro: Campus, 2002.

TIPLER, P. A. Física para cientistas e engenheiros, Vol. 4, 4ª ed. Rio de Janeiro: LTC, 2003.

LEVINE, I. N. Quantum Chemistry; 6th Edition; Pearson/Prentice Hall; 2009.

Textos fornecidos pelo professor.



Profa. Dra. Ana Claudia Monteiro Carvalho  
Docente Responsável



Prof. Dr. Alessandro Damásio Trani Gomes  
Coordenador do Curso

São João Del Rei-MG, 27 de setembro de 2019.

Aprovado pelo Colegiado em: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_