



Universidade Federal  
de São João del-Rei

## COORDENADORIA DO CURSO DE FÍSICA

### PLANO DE ENSINO



**UNIDADE CURRICULAR:** Tópicos de Mecânica Quântica para átomos e moléculas

**PERÍODO:**

**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:** 2021

**SEMESTRE:** 2º Semestre Remoto

#### 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

Atividades síncronas e assíncronas onde serão discutidos os conceitos de física. Atividades individuais e em grupo (listas de exercício, atividades com simuladores e leituras complementares) serão realizadas de maneira remota. Todo curso será disponibilizado no Portal Didático. Haverá horário de atendimento remoto 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). A frequência dos alunos será contabilizada por meio da realização das Atividades Avaliativas desenvolvidas ao longo do Curso.

Se  $N_{final} < 6$ , o aluno terá direito a fazer uma atividade que substituirá a menor nota entre as Atividades 1, 2 e 3, caso o resultado da Atividade Substitutiva for superior à uma das  $Ativ_1$ ,  $Ativ_2$  ou  $Ativ_3$  (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.

#### 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, 21 de junho de 2021.

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