



Universidade Federal
de São João del-Rei

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA E QUÍMICA DE MATERIAIS
FQMAT

PLANO DE ENSINO

Unidade Curricular: Mecânica Quântica

Currículo: 2011

Docente Responsável: Josefredo R. Pliego Jr.

Unidade Acadêmica: DCNAT

UC Obrigatória () UC Eletiva (X) Tópicos Especiais ()

C.H. Total: 60

Ano: 2023

Semestre: 2º Semestre

EMENTA

O formalismo da Mecânica Quântica e sua interpretação. A equação de Schrödinger. Potenciais unidimensionais. Potenciais periódicos, bandas. Oscilador harmônico linear, Modos vibracionais, fônons. Forças centrais e momento angular. Átomo de hidrogênio. Orbitais atômicos e Orbitais híbridos. Teoria de Perturbação independente do tempo, ligação química.

OBJETIVOS

Aprofundar nos fundamentos da mecânica quântica, com aplicação a sistemas atômicos e moleculares.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

- 1) Equação de Schrodinger: partícula livre e na caixa
- 2) Operadores
- 3) Oscilador harmônico
- 4) Momento angular
- 5) O átomo de hidrogênio
- 6) Teoremas da mecânica quântica
- 7) Método variacional
- 8) Teoria de perturbação
- 9) Spin e átomos multieletrônicos
- 10) Método de Hartree-Fock
- 11) Moléculas e ligação química

METODOLOGIA DE ENSINO E RECURSOS AUXILIARES

A disciplina será ministrada através de aulas expositivas e aulas de exercícios.

FORMA E CRONOGRAMA DE AVALIAÇÃO

A avaliação será feita por duas provas, valendo 80% da nota final (40% cada), e trabalhos, valendo 20% da nota final.

BIBLIOGRAFIA

- I.N. Levine, Quantum Chemistry, 6a. ed.; Prentice Hall: New Jersey, 2008.
- Messiah, A., Quantum Mechanics, Dover: New York, 1999.
- Levi, A. F. J. , Applied Quantum Mechanics, Cambridge University Press, 2006.
- Sakurai, J.J. , Modern Quantum Mechanics, Revised Edition, Addison Wesley: Reading, 1994.
- Cohen-Tannoudji, C. , Din, B. e Laloe, F. Quantum Mechanics, Wiley: New York, 2006.
- J. I. Gersten, e F. W. Smith, The Physics and Chemistry of Materials, John Wiley & Sons, 2001

Docente Responsável

Aprovado pelo Colegiado em / / .

Coordenador do Curso