

# Programa Analítico de Disciplina

## QAM 455 - Tópicos em Química Quântica

Campus Rio Paranaíba -

Catálogo: 2023

Número de créditos: 2

Carga horária semestral: 30h

Carga horária semanal teórica: 2h

Carga horária semanal prática: 0h

Carga horária de extensão: 0h

Semestres: II

### Objetivos

Espera-se que os alunos sejam desafiados a utilizarem os conteúdos anteriores correlacionados aos aprendizados em cálculo, equações diferenciais física e físico-química. O curso foi desenvolvido como tópico avançado, devendo ser percebido como metodologia de aprofundamento de conhecimentos dos cursos de Físico-química III e IV; entretanto os assuntos abordados, estão tecnicamente longe de serem esgotados, sendo portanto em verdade uma introdução aos assuntos abordados, pois que os tópicos em si ensejam uma robustez de conteúdos que somente poderia ser alcançada em vários semestres para cada unidade.

### Ementa

Postulados da Mecânica Quântica. Mecânica molecular. Métodos semi-empíricos (Parte I). Métodos semi-empíricos (Parte II). Métodos ab initio. Métodos pós-SCF. Teoria do funcional de densidade.

### Pré e correquisitos

FRP 203 e QAM 251 e QAM 350

### Oferecimentos obrigatórios

*Não definidos*

### Oferecimentos optativos

**Curso****Grupo de optativas**

Química - Bacharelado

Geral

## QAM 455 - Tópicos em Química Quântica

Conteúdo					
Unidade	T	P	ED	Pj	To
<b>1. Postulados da Mecânica Quântica</b> 1. Histórico do desenvolvimento 2. Personalidades 3. Descrição das equações e operações 4. As Subdivisões da química Teórica 5. Propriedades Macroscópicas e Microscópicas	2h	0h	0h	0h	2h
<b>2. Mecânica molecular</b> 1. Princípios elementares 2. Estruturas das equações empregadas 3. Abrangência e utilidade 4. Exemplos	4h	0h	0h	0h	4h
<b>3. Métodos semi-empíricos (Parte I)</b> 1. Estrutura matemática dos métodos 2. Austim Model 1 - AM1 3. Estrutura matemática 4. Aplicabilidade 5. Exemplos	6h	0h	0h	0h	6h
<b>4. Métodos semi-empíricos (Parte II)</b> 1. Parametric model 3 -PM3 2. Estrutura matemática 3. Aplicabilidade 4. Exemplos	4h	0h	0h	0h	4h
<b>5. Métodos ab initio</b> 1. Tratamento matemático 2. As funções de base 3. As aproximações de Born-Oppenheimer 4. As equações de Roothan-Fock 5. O método do campo auto-consistente 6. O delta de Kronecker 7. O método Hartree-Fock 1. Energia de ligação 2. Geometria molecular .1 8. Momento de Dipolo e Moléculas Polares .1 1. Hibridização de Orbitais Atômicos .1 2. Barreiras de energia	6h	0h	0h	0h	6h
<b>6. Métodos pós-SCF</b> 1. Teoria de perturbação 2. Teoria de perturbação de 2a ordem de Møller-Plesset 3. As equações envolvidas 4. Efeitos do truncamento 5. Cálculos 6. Aplicabilidade	4h	0h	0h	0h	4h
<b>7. Teoria do funcional de densidade</b> 1. Teoria de ondas planas	4h	0h	0h	0h	4h

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://siadoc.ufv.br/validar-documento> com o código: EKSR.HBSE.DY32

2.Os teoremas fundamentais de Thomas-Fermi 3.As integrais de densidade 4.O teorema de Levi e a busca restrita de Levi 5.Os teoremas de Hohenberg-Kohn 6.As equações de Kohn-Sham					
<b>Total</b>	<b>30h</b>	<b>0h</b>	<b>0h</b>	<b>0h</b>	<b>30h</b>

Teórica (T); Prática (P); Estudo Dirigido (ED); Projeto (Pj); Total (To);

<b>Planejamento pedagógico</b>	
<b>Carga horária</b>	<b>Itens</b>
Teórica	Apresentação de conteúdo oral e escrito em quadro convencional; Apresentação de conteúdo oral e escrito com o apoio de equipamento (projetor, quadro-digital, TV, outros); Apresentação de conteúdo utilizando aprendizado ativo; Debate mediado pelo professor; e Apresentação de conteúdo pelos estudantes, mediado pelo professor
Prática	Prática demonstrativa realizada pelo professor ou monitor, Prática executada por todos os estudantes, Prática investigativa executada por todos os estudantes, Resolução de problemas e Desenvolvimento de projeto
Estudo Dirigido	Estudo dirigido, Resolução de problemas, Leitura conduzida e Projeto
Projeto	Desenvolvimento de projeto
Recursos auxiliares	<i>Não definidos</i>

## QAM 455 - Tópicos em Química Quântica

### Bibliografias básicas

Descrição	Exemplares
LEVINE, I.N. Quantum Chemistry. 6. ed. New York: Prentice Hall, 2008. 739p.	0
McQUARRIE, D.A. Physical Chemistry - a molecular approach. University Science Books, 1997. 1360p.	6
RUSSEL, J.B. Química Geral. Vol. 2. 2. ed. São Paulo: Makron Books, 1994. 647 p.	30

### Bibliografias complementares

Descrição	Exemplares
CHANG, R. Química Geral. 4. ed. São Paulo: McGraw-Hill, 2007. 800 p.	29
EISBERG, R. Física quântica. 9. ed. São Paulo: Campus, 1994. 928p.	0
KOTZ, J. C.; TREICHEL, P.; WEAVER, G. C. Química geral e reações químicas. Vol. 2. 6. ed. Paulo: Cengage Learning, 2009. 476p.	10
MAHAN, B. M.; MYERS, R. J. Química um Curso Universitário. 4. ed. São Paulo: Edgard Blücher, 1995. 582 p.	10
SZABO, A. Modern quantum chemistry - introduction to advanced electronic structure theory. New York: Mc Graw-Hill, 1996. 461p.	0