



PLANO DE CURSO

Disciplina: Tópicos de Mecânica Quântica para átomos e moléculas	Semestre letivo: 2025/02
--	--------------------------

Professor(es): Ana Claudia Monteiro Carvalho
--

Informações gerais sobre a disciplina:

A disciplina tem como objetivo 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. Proporcionar aos estudantes de física o conhecimento sobre os fundamentos da Física Quântica em nível intermediário e introduzir as bases conceituais (com rigor matemático) das teorias para cálculo de estruturas atômicas e moleculares.

Programação de aulas: (indicar a ementa e o número de aulas - mesmo que aproximado - para cada tópico do curso).

As unidades programáticas abordadas neste curso são:

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 C6H6, C2H2, C2H4, entre outras

A distribuição das aulas será:

As aulas deverão ser apresentadas de forma expositiva. No final de cada assunto um ou mais exemplos de devem ser resolvidos para os alunos. A avaliação será feita por meio de 03 testes de verificação de conhecimento (TVC).

Durante as 10 primeiras aulas (5 semanas) será abordado o item 1 apresentado na unidade programática. A aula seguinte a essas será reservada para a primeira avaliação (1º TVC). Durante as 10 aulas seguintes (5 semanas) serão abordados os itens 2 e 3 apresentados na unidade programática. A aula seguinte a essas será reservada para a segunda avaliação (2º TVC). Durante as 8 aulas seguintes (4 semanas) será abordados o item 4 apresentado na unidade programática. A aula seguinte a essas será reservada para a terceira avaliação (3º TVC).

A última aula será reservada para uma prova de segunda chamada para alunos que perderam, com justificativa documental, uma ou mais das avaliações obrigatórias programadas. A prova deverá conter 06 questões em que, as duas primeiras abordarão assuntos correspondentes ao 1º TVC, as duas seguintes abordarão assuntos correspondentes ao 2º TVC e as duas últimas abordarão assuntos correspondentes ao 3º TVC. O estudante deverá fazer somente as questões correspondentes aos TVC's que tenha perdido. Esta poderá ser usada também como Opcional para alunos que desejarem melhorar a menor nota



entre os TVC's. Nesse caso, deve-se resolver as duas questões correspondentes ao conteúdo do TVC cuja nota se deseja substituir mais duas outras questões escolhidas dos conteúdos dos outros TVC's, onde cada questão escolhida deve ser de conteúdos de diferentes TVC's.. Cada questão vale 25 pontos quando usada como Opcional e vale 50 pontos quando usada como 2a Chamada.

Critério de avaliação: (tipos de avaliação e seus respectivos pesos)

A avaliação será feita por meio de 03 testes de verificação de conhecimento (TVC). A nota final será calculada a partir da média aritmética das notas dos três TVC's. Existe a possibilidade de que questões teóricas (e ou de cálculo) sejam oferecidas ao longo do curso na forma de um trabalho em grupo, que deverá ser entregue um dia antes de cada TVC. Nesse caso, o trabalho valerá 10 pontos enquanto as questões restantes do TVC somarão 90 pontos.

Datas das avaliações: (informar se possível, os tópicos a serem cobrados)

TVC 01 - (21/10/2025) Revisão de Mecânica Quântica

TVC 02 - (02/12/2025) Método Hartree-Fock ; Teoria do Funcional de Densidade

TVC 03 - (22/01/2026) Cálculo de estrutura e propriedades de pequenas moléculas

2a Chamada / Opcional – (29/01/2026): Conteúdos correspondentes aos TVC's perdidos. O aluno que alcançar média igual ou superior a 60 estarão aprovados.

Horários de atendimento:

Segunda de 13:00h as 15:00h

Bibliografia (indicar livro texto e bibliografia complementar, quando for o caso):

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

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

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

[4] EISBERB, R.; RESNICK, R. Física Quântica: átomos, moléculas...; 18^a ed. Rio de Janeiro: Campus, 2002.

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

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

[7] Textos fornecidos pelo professor.

Informações adicionais relevantes para o aluno:

Profa. Dra. Ana Claudia M. Carvalho