



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
212009 – QUÍMICA QUÂNTICA BÁSICA

CRÉDITOS: 04 (quatro) – 60 horas/aula

EMENTA: Fundamentos da Mecânica Quântica Matricial e conceitos de subespaço e base e operadores Hermitianos. Aplicação da Equação Secular e de teoria de grupos para obtenção de diagrama de orbitais moleculares de diversas moléculas e discussão de propriedades físico-químicas a partir da estrutura eletrônica

PROGRAMA:

1. Subespaço e base.
2. Descrição matricial vetores dos operadores quânticos.
3. Equação secular.
4. Método de Hartree-Fock, integrais de 1 elétrons e de 2 elétrons.
5. Conceito de correlação eletrônica.
6. Aplicação da equação secular, com auxílio de teoria de grupos para a obtenção de orbitais moleculares para H₂, eteno, butadieno, água, amônia, acetona, benzeno, compostos de coordenação.
7. Diferença entre representação irredutível para orbitais e para função de onda total.
8. Teoria de Fukui para orbitais de fronteira.
9. Regras de Woodward-Hoffmann.
10. Teoria de perturbação e aplicações.
11. Regra de Ouro de Fermi e espectroscopia eletrônica.
12. Regras de seleção.
13. Princípio de Jahn-Teller.
14. Fotoquímica.
15. Correção de correlação eletrônica e métodos pós-Hartree-Fock.
16. Introdução à Teoria do Funcional da Densidade

BIBLIOGRAFIA:

1. LEVINE, Ira N. Quantum Chemistry. 4.ed. Prentice Hall, 1991.
2. A. Fazzio, K. Watari, Introdução à Teoria de Grupos com aplicações em moléculas e sólidos, UFSM, Brasil, 1998.
3. A. Szabo, N. S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry Introduction to Advanced

Electronic Structure Theory, Dover Publications, INC, New York, 1996.

4. C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Quantum Mechanics, Willey & Sons, Carlifornia, 1977.

5. Artigos específicos sobre aplicações da química quântica.

Prof. Dr. Renato Camargo Matos

Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Química
Universidade Federal de Juiz de Fora



Documento assinado eletronicamente por **Renato Camargo Matos, Coordenador(a)**, em 25/11/2022, às 18:11, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no Portal do SEI-Ufjf (www2.ufjf.br/SEI) através do ícone Conferência de Documentos, informando o código verificador **1008987** e o código CRC **CDF3F41**.