

[Digite texto]



Ministério da Educação
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
Setor de Ciências Exatas
Departamento de Química

Ficha 1 (permanente)

Disciplina: Química Quântica		Código: CQ246				
Natureza: (X) Obrigatória () Optativa		(X) Semestral () Anual () Modular				
Pré-requisito: CQ240 e CM303.		Co-requisito: ---		Modalidade:(x) Presencial () Totalmente EaD()..... % EaD*		
CH Total: 60	Padrão (PD): 4	Laboratório (LB):0	Campo (CP): 0	Estágio (ES): 0	Orientada (OR):0	Prática Específica (PE): 0
CH semanal: 4						
EMENTA (Unidade Didática)						
Postulados da Mecânica Quântica. Equação de Schroedinger e funções de onda. Partícula em uma caixa. Rotor rígido. Oscilador harmônico. Orbitais atômicos. Spin. Aproximações para orbitais de átomos multieletrônicos. Teoria da ligação de valência. Teoria do orbital molecular. Aplicações de Teoria de Grupos à análise de orbitais moleculares. Aproximação de Hückel. Cálculo de propriedades moleculares. Teoria de bandas.						
Chefe de Departamento:						
Assinatura: _____						

*OBS (1): ao assinalar a opção % EAD, indicar a carga horária que será à distância.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA (mínimo 03 títulos)

- P. W. Atkins e J. de Paula, *Físico-Química*, Vol. 2, 6ª, 7ª ou 8ª edição, LTC Editora S.A, RJ (1999, 2003 e 2006).
- M. Trsic e M. F. S. Pinto, *Química Quântica – Fundamentos e Aplicações*, Manole (2009).
- A. V. Bunge, *Introdução à Química Quântica*, Edgar Blücher (1977).
- D. K. Sebera, *Estrutura Eletrônica e Ligação Química*, Polígono (1968).

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR (mínimo 05 títulos)

- 1) P. F. dos Santos Filho, *Estrutura Atômica e Ligação Química*, Unicamp (2000).
- 2) P. W. Atkins e R. S. Friedman, *Molecular Quantum Mechanics*, Oxford University Press, 3ª edição (1997) (língua Inglesa).
- 3) I. N. Levine, *Quantum Chemistry*, Prentice Hall, 7ª edição (2013) (língua inglesa).