

INTRODUÇÃO À QUÍMICA QUÂNTICA

Pré-requisitos: CM 041 + CQ 413

Carga horária: 02 horas / semana

Horário (turma Q10P-N, noturno): sextas-feiras de 18:00 h às 20:00 h

Professor: Joaquim D. Da Motta Neto

Código: CQ305

Créditos: 02

I. Conteúdo programático geral.

- i) **Fundamentos da mecânica quântica.** Radiação de corpo negro. A equação de Planck. Einstein e o efeito fotoelétrico. Comportamento corpuscular e ondulatório. Operadores. Postulados da mecânica quântica. Princípio da incerteza.
- ii) **Sistemas quânticos simples.** Partícula numa caixa. Barreiras de potencial. Oscilador harmônico. Átomo hidrogenóide (rotor não-rígido) e seu espectro.

O material de apoio (*handouts* das aulas, listas de exercícios etc.) estará disponível no *site* <https://www.quimica.ufpr.br/paginas/joaquim-motta/CQ305> até o dia **20 de dezembro de 2024**.

II. Avaliação: a nota dependerá de dois itens: a frequência do aluno e seu desempenho no corpo de tarefas designada pelo professor responsável. A frequência mínima **exigida** é de 75% das aulas ministradas. Assim sendo, será considerado reprovado por falta (RF) o aluno que não atingir esta frequência. Casos extraordinários (falta por doença etc.) serão resolvidos a critério do professor responsável. Serão considerados aprovados por média (AM) os alunos que, além de obterem a frequência mínima, atingirem média igual ou superior a 70 (setenta) após computada a nota de duas provas escritas, a serem aplicadas nas seguintes datas:

18 de outubro – 13 de dezembro

Algumas atividades adicionais serão ofertadas como oportunidades de conseguir crédito extra a critério do professor responsável.

Recomenda-se que o aluno procure construir uma boa média desde o começo, quando a quantidade de matéria é menor.

Consulte o professor em caso de dúvida ! Não espere até a última hora !

Será aplicado um exame final em **20 de dezembro de 2024**. Serão considerados aprovados após o exame final (AF) os alunos que alcançarem média final igual ou maior que 50 (cinquenta).

O gabarito de cada prova será afixado no quadro de avisos para consulta. Em caso de dúvida, o professor responsável estará disponível para esclarecimentos. Recomenda-se que cada aluno esteja constantemente a par de sua situação, de modo a evitar situações de última hora.

O professor tem de se preocupar com uma turma inteira, por isso ele não pode ser responsável por um aluno apenas. Cada aluno é responsável por tomar a iniciativa de procurar o auxílio do professor se achar necessário.

III. Intenção de cronograma:

Primeira parte: Física Moderna. Fundamentos filosóficos da Teoria Quântica.

6 de setembro	Aula 1. Apresentação. Leitura do syllabus. Radiação de corpo negro.
	Aula 2. Efeito fotoelétrico. Efeito Compton. Dualidade onda-partícula.
13 de setembro	Aula 3. Operadores. Matrizes. Equações de autovalor. Degenerescência.
20 de setembro	Aula 4. Revisão e exercícios.
23-27 de setembro	Semana Acadêmica da Química. Não haverá aula.
27 de setembro	Aula 5. Postulados da Mecânica Quântica. Equação de Schrödinger.
4 de outubro	Aula 6. Princípio da Incerteza. <i>Gedankenexperiments</i> .
11 de outubro	Aula 7. Revisão e exercícios.
18 de outubro	Primeira prova. Toda a matéria das sete primeiras aulas.

Segunda parte: problemas que podem ser resolvidos exatamente. Modelos quânticos.

25 de outubro	Aula 8. Revisão de equações diferenciais. Truncamento de séries.
1 de novembro	Aula 9. Sistemas quânticos simples. Partícula livre. Caixas de potencial. Poço.
8 de novembro	Aula 10. Revisão e exercícios.
15 de novembro	Feriado cívico. Proclamação da República.
22 de novembro	Aula 11. Oscilador harmônico unidimensional. Espectro vibracional.
29 de novembro	Aula 12. Estrutura da matéria. Átomo de Rutherford. Átomo de Bohr.
29 de novembro	Aula 13. Séries espectrais. Rotor não-rígido. Átomos hidrogenóides.
6 de dezembro	Aula 14. Revisão e exercícios.
13 de dezembro	Segunda prova. Toda a matéria da oitava à décima-quarta aulas.
14 de dezembro	Último dia letivo do Segundo Semestre de 2024.
20 de dezembro	Exame final do Segundo Semestre de 2024.