|  |  |
| --- | --- |
| color_1024x768 | **UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA**  **PROGRAMA DE DISCIPLINA** |

DEPARTAMENTO:

|  |
| --- |
| **QUÍMICA** |

IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| CÓDIGO | NOME (CARGA HORÁRIA - CRÉDITOS) | CARÁTER |
| **QMC1821** | **Físico-Química Avançada III (45-3)** | **Eletiva** |

EMENTA:

|  |
| --- |
| Postulados da mecânica quântica. Interpretação física de observáveis e funções de onda. Problemas simples em sistemas modelo. Momento Angular. Sistemas de muitas partículas. Estrutura eletrônica de átomos e moléculas. |

PROGRAMA:

|  |
| --- |
| TÍTULO E DISCRIMINAÇÃO DAS UNIDADES |
| UNIDADE 1 - Os postulados da Mecânica Quântica  UNIDADE 2 - A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER  UNIDADE 3 - ESTADOS ESTACIONÁRIOS, PROBABILIDADE, OBSERVÁVEIS FÍSICOS, OPERADORES E TEORIA DE MEDIDA  UNIDADE 4 - RELAÇÕES DE INDETERMINAÇÃO  UNIDADE 5 - POTENCIAIS UNIDIMENSIONAIS  5.1 - Potencial degrau  5.2 - Barreira de potencial  5.3 - Poço de potencial  5.4 - Partícula em uma caixa  5.5 - Oscilador harmônico  UNIDADE 6 - MOMENTO ANGULAR  UNIDADE 7 - O ÁTOMO DE HIDROGÊNIO E AS PROPRIEDADES DE ÁTOMOS HIDROGENÓIDES  UNIDADE 8 - SPIN ELETRÔNICO  UNIDADE 9 - ACOPLAMENTO DE MOMENTOS ANGULARES E DE SPIN  UNIDADE 10 - TEORIA DAS PERTURBAÇÕES E CÁLCULO VARIACIONAL  UNIDADE 11 - SISTEMAS DE PARTÍCULAS IDÊNTICAS  UNIDADE 12 – FUNÇÕES DE ONDA ELETRÔNICAS PARA MOLÉCULAS  UNIDADE 13 - TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR |

BIBLIOGRAFIA:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| BIBLIOGRAFIA BÁSICA E COMPLEMENTAR | | |
| ATKINS P. W.; FRIEDMAN R. S.; **Molecular Quantum Mechanics**, 3rd Ed., Oxford University Press, Oxford, 1997.  GRIFFITHS D. J.; **Mecânica Quântica**, 2ª Ed., Pearson, São Paulo, 2011.  LEVINE I.; **Quantum Chemistry**, 4th Ed., Prentice Hall Inc., New York, 1991.  SZABO A.; OSTLUND N. S.; **Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory**, Dover Publications, New York, 1989.  JENSEN F.; **Introduction to Computational Chemistry**, John Wiley & Sons, New York, 1997.  GASIOROWICS S.; **Quantum Mechanics**, John Wiley & Sons, New York, 1974.  Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área. | | |
| Data: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_    \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  Coordenador do Curso | | Data: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  Chefe do Departamento |