|  |  |
| --- | --- |
| 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 QuânticaUNIDADE 2 - A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGERUNIDADE 3 - ESTADOS ESTACIONÁRIOS, PROBABILIDADE, OBSERVÁVEIS FÍSICOS, OPERADORES E TEORIA DE MEDIDAUNIDADE 4 - RELAÇÕES DE INDETERMINAÇÃOUNIDADE 5 - POTENCIAIS UNIDIMENSIONAIS5.1 - Potencial degrau5.2 - Barreira de potencial5.3 - Poço de potencial5.4 - Partícula em uma caixa5.5 - Oscilador harmônicoUNIDADE 6 - MOMENTO ANGULARUNIDADE 7 - O ÁTOMO DE HIDROGÊNIO E AS PROPRIEDADES DE ÁTOMOS HIDROGENÓIDESUNIDADE 8 - SPIN ELETRÔNICOUNIDADE 9 - ACOPLAMENTO DE MOMENTOS ANGULARES E DE SPINUNIDADE 10 - TEORIA DAS PERTURBAÇÕES E CÁLCULO VARIACIONALUNIDADE 11 - SISTEMAS DE PARTÍCULAS IDÊNTICASUNIDADE 12 – FUNÇÕES DE ONDA ELETRÔNICAS PARA MOLÉCULASUNIDADE 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 |