



Universidade Federal do Ceará  
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação

PROGRAMA DE DISCIPLINA

<b>1. IDENTIFICAÇÃO DO PROGRAMA:</b>		
Programa de Pós-Graduação em Química		
<b>2. TIPO DE COMPONENTE:</b>		
Atividade ( )	Disciplina ( X )	Módulo ( )
<b>3. NÍVEL:</b>		
Mestrado ( X )		Doutorado ( X )
<b>4. IDENTIFICAÇÃO DO COMPONENTE:</b>		
Nome:	Físico-Química Avançada 2	
Código:	CEP9544	
Carga Horária	<b>160</b>	
Nº de Créditos:	<b>10</b>	
Optativa:	Sim ( )	Não ( X )
Obrigatória:	Sim ( X )	Não ( )
Área de Concentração:	Físico-Química (Doutorado)	
<b>5. DOCENTES RESPONSÁVEIS:</b>		
Prof. Pedro de Lima Neto Profª. Adriana Nunes Correia Prof. Antoninho Valentini		
<b>6. EMENTA:</b>		
Origens da mecânica quântica, modelo atômico de Bohr, Série espectroscópica de Balmer, dualidade onda-partícula, princípio da incerteza de Heisenberg. Postulados e formalismo da mecânica quântica, operadores da mecânica quântica, autofunção, autovalores. Equação de Schrödinger e soluções para o problema da partícula na caixa e aplicação na espectroscopia eletrônica de hidrocarbonetos com ligações duplas conjugadas. Modelo quântico do oscilador harmônico e aplicação na espectroscopia vibracional de moléculas diatômicas. Modelo quântico do rotor rígido e aplicação na espectroscopia rotacional de moléculas diatômicas. Solução exata da Equação de Schroedinger para o átomo de hidrogênio. Modelos de aproximação: método variacional e teoria da perturbação. Teoria dos orbitais moleculares. Métodos clássicos e quânticos de modelagem molecular.		
<b>7. PROGRAMA DA DISCIPLINA/ATIVIDADE/MÓDULO:</b>		
<b>Parte Teórica</b>		
<b>1. Origens da mecânica quântica.</b> Radiação do corpo negro. Efeito fotoelétrico. Átomo de Bohr. Espectro atômico do hidrogênio. Dualidade onda-partícula.		
<b>2. Formalismo matemático da mecânica quântica.</b> Operadores lineares. Autofunções e autovalores. Notação de Dirac. Notação de matriz. Operadores Hermetianos. Postulados da mecânica quântica. Princípio de incerteza. Equação de Schrödinger.		

### 3. Aplicações da Equação de Schrödinger

Modelo da partícula na caixa e sua aplicação para prever o espectro de moléculas orgânicas com ligações duplas conjugadas. Modelo do oscilador harmônico e sua aplicação à espectroscopia vibracional. Modelo do rotor rígido e a sua aplicação à espectroscopia rotacional. Átomo de hidrogênio.

### 4. Modelos de aproximação:

Método variacional e Teoria da Perturbação.

### 5. Orbitais moleculares.

## Parte Prática

1. Princípios de modelagem molecular: métodos clássicos e quânticos.
2. Análise conformacional de moléculas pequenas
3. Cálculos de energia dos orbitais de fronteira HOMO e LUMO usando método DFT.
4. Estudo da barreira de energia de rotação da ligação carbono-carbono usando método de mecânica molecular.
5. Calor de combustão usando métodos semi-empíricos.
6. Cálculos de energia da interação soluto-solvente usando dinâmica molecular,
7. Cálculos de energia de interação adsorbato-superfície usando dinâmica molecular.
8. Cálculo do espectro vibracional e eletrônico de moléculas orgânicas usando DFT.
9. Modelagem de estrutura tridimensional de uma proteína.

## 8. FORMA DE AVALIAÇÃO:

Provas, seminários, relatórios.

Frequência igual ou superior à 75%

## 9. BIBLIOGRAFIA:

### Básica

1. D. A. McQuarrie, J. D. Simon, Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Book, Sausalito, California, USA, 1997.
2. L. Alcácer, Introdução à Mecânica Quântica com Aplicações à Química Computacional Moderna, Editora Livraria da Física, São Paulo, Brasil, 2012.
3. I. R. Levine, Quantum Chemistry, 6th, Pearson Education Inc, New York, USA, 2009.

### Complementar

1. E. Hollauer, Química Quântica. LTC, Rio de Janeiro, Brasil, 2008.
2. Atkins, P.W. "Molecular Quantum Mechanics", 5ª ed. Oxford University Press, 2011.
3. Cramer, C.J., Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2th ed., John Wiley & Sons, New York, 2002.
4. Braga, J. P.; Fundamentos de Química Quântica, Editora UFV, Brasil, 2007.
5. Artigos Científicos