



**UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO**  
**PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO**  
**SECRETARIA ACADÊMICA DE PÓS-GRADUAÇÃO (SAPG)**

**PROGRAMA ANALÍTICO**

DISCIPLINA

<b>Código:</b> I ___ -1 _____	<b>Nome:</b> Modelos da Química Quântica
<b>Créditos:</b> 3	<b>Carga Horária:</b> 45

**DEPARTAMENTO DE:**

**INSTITUTO DE:**

**PROFESSOR(ES):** Nome completo sem abreviações e matrícula SIAPE (UFRRJ) ou se de instituição de pesquisa o CPF. Endereço eletrônico para contato.

**OBJETIVOS:** Apresentar objetivo geral e/ou específico da disciplina. Este item pode ser exigido em alguns Programas de pós-graduação de forma mais extensa.

**EMENTA:** Física Moderna e Teoria Quântica: Tópicos em Física Moderna (Radiação

de Corpo Negro, Espectros Atômicos, Efeito Fotoelétrico); Modelo de Bohr para o Átomo de Hidrogênio; Equação de de Broglie. Sistemas Modelo em Química Quântica: Postulados da Mecânica Quântica; Partícula na caixa Oscilador Harmônico; Rotor rígido 2D e 3D; Átomo de Hidrogênio. Átomos polieletrônicos: Momento angular; Spin e momento angular; Antissimetria e Determinantes de Slater; Método variacional; Teoria de Perturbação em 1ª ordem. Moléculas Diatômicas Homonucleares: aproximação de Born-Oppenheimer; Expressão geral para a energia de um sistema de camada fechada.

#### **CONTEÚDO PROGRAMÁTICO:**

1. Discriminar os temas apresentados na ementa na forma de itens e subitens.
2. O conteúdo programático pode e deve ser atualizado com frequência pelos professores, mantendo a obrigatoriedade de abordar os temas apresentados na ementa.
3. O programa deve ser adequado ao número de créditos da mesma e pode envolver atividades extraclasse com supervisão do professor responsável ou colaboradores eventuais, que são consideradas na carga horária adicional de 30 a 45 horas-aula por crédito prático.

**METODOLOGIA:** Item exigido em alguns Programas de Pós-graduação.

**BIBLIOGRAFIA:** (usar normas ABNT para as citações)

#### **BÁSICA:**

- D. Ball, Físico-Química, Vol1., Thomson (2007)
- E. Hollauer, Química Quântica, LTC (2008)
- G. H. Grant, W. G. Richards, "Computational Chemistry", Oxford Science Publications (1995).
- I. Levine, "Quantum Chemistry", Ed. Prentice Hall, (2008).
- A. R. Leach, "Molecular Modelling: Principles and Applications", Ed. Prentice Hall, (2001).

**COMPLEMENTAR:** Outras publicações disponíveis através do docente ou em bibliotecas que o aluno tenha acesso livre.

**PERÍODICOS CIENTÍFICOS E OUTROS:** O conteúdo do programa deve ser respaldado por bibliografia adequada e atual, que inclua periódicos e textos científicos de revisão relevantes na subárea de conhecimento da disciplina.

