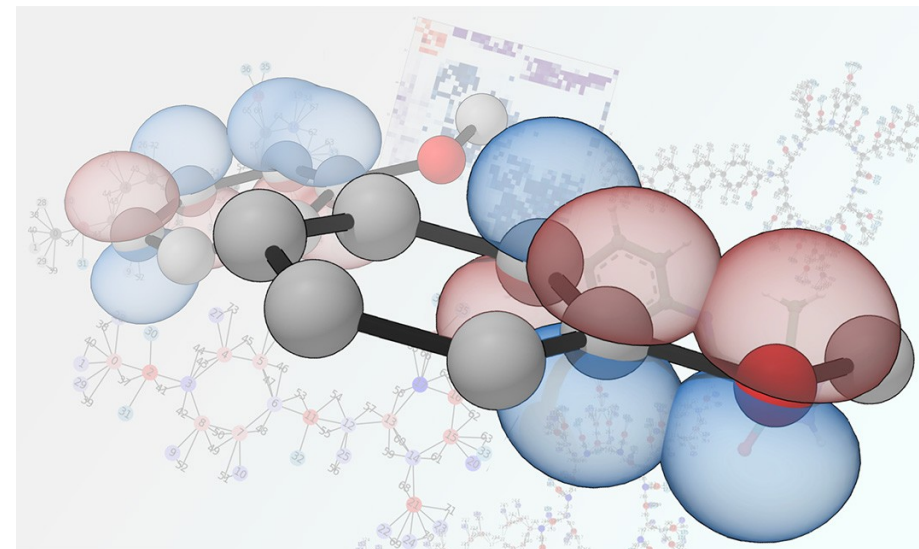


Aula 01 – Apresentação do Curso

Onde queremos chegar?



Prof. Elvis Soares
elvis@peq.coppe.ufrj.br

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle$$

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle e^{-iEt/\hbar}$$

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

Infos

Horário de aulas: 3a e 5a, 13:00-15:00

Sala de Aula:

Calendário: 24/Jun - 11/Set (~24 encontros)

CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO

- 20% de Presença e Participação
- 40% de Listas de Exercícios (~8 listas)
- 40% de Projeto Final

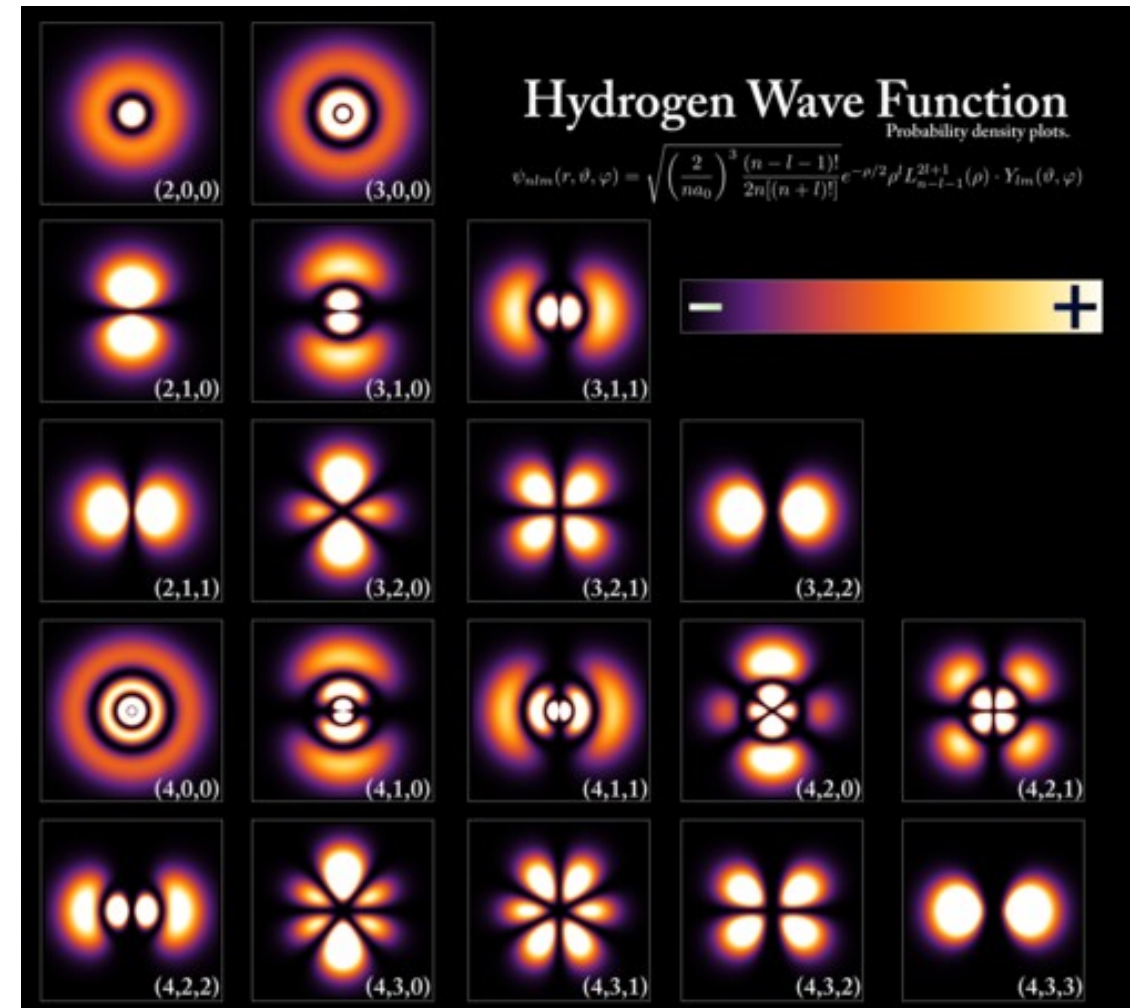
EMENTA

- 1) Fundamentos da Mecânica Quântica;
- 2) Estrutura Eletrônica de Átomos e Moléculas;
- 3) Teoria do Funcional da Densidade;
- 4) Estrutura Eletrônica de Sólidos;
- 5) Aplicações na Engenharia Química.

Tópicos a serem Abordados

1) Fundamentos da Mecânica Quântica;

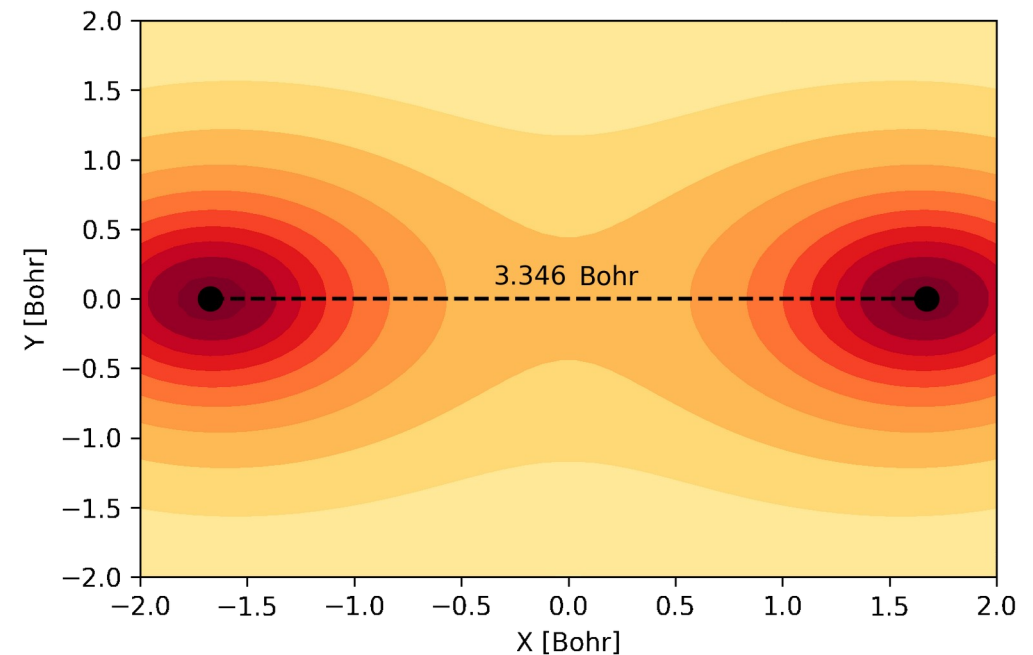
- i. Experimentos Fundadores da Mecânica Quântica
- ii. Bases Teóricas da Mecânica Quântica
- iii. Postulados da Mecânica Quântica
- iv. Operadores na Mecânica Quântica: posição, momento linear, momento angular e spin
- v. Álgebra de Operadores: Auto-valores, auto-vetores, mudança de base, comutadores
- vi. Equação de Schroedinger
- vii. Interpretação Probabilística da função de onda
- viii. Aplicações: Poço Quadrado, Tunelamento, Rotor rígido, Oscilador harmônico
- ix. Átomo de Hidrogênio



Tópicos a serem Abordados

2) Estrutura Eletrônica de Átomos e Moléculas;

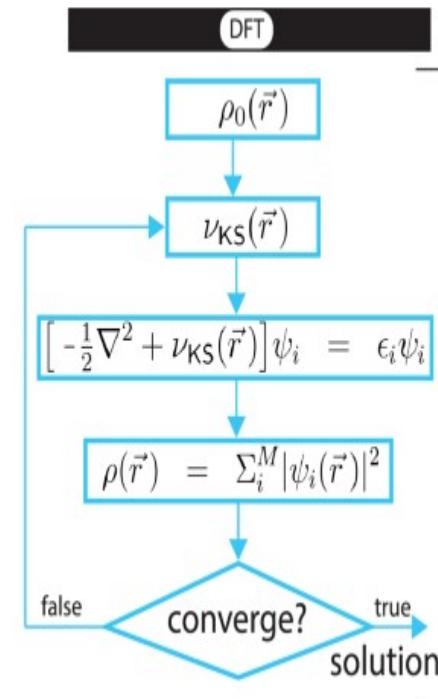
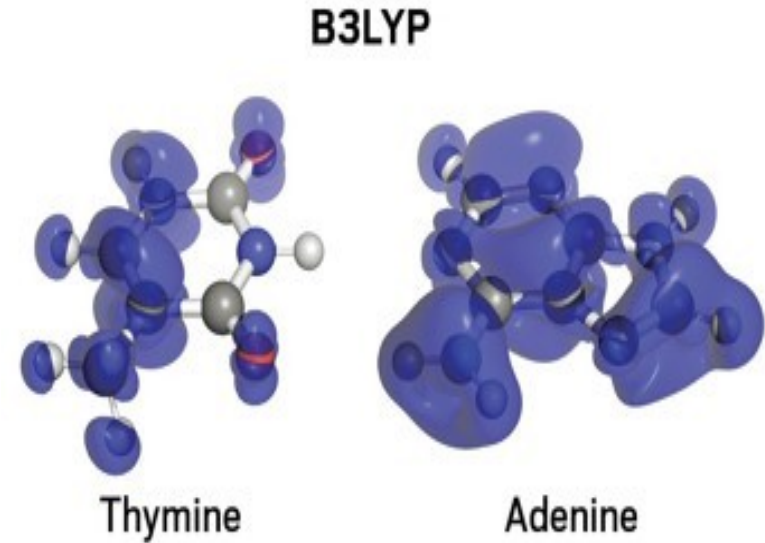
- i. O problema eletrônico
- ii. Aproximação de Born-Oppenheimer
- iii. Teorema Variacional: aplicação no Átomo de He e molécula de H₂
- iv. Determinante de Slater
- v. Método de Hartree-Fock
- vi. Conjunto de Base
- vii. Equações de Roothan e método auto-consistente
- viii. Discussão de métodos pós-HF e semi-empíricos
- ix. Teorias de perturbação
- x. Densidade eletrônica, momento de dipolo elétrico e polarizabilidade
- xi. Interação da radiação com moléculas
- xii. Espectro micro-ondas e a rotação molecular
- xiii. Espectro IR e Raman e a vibração molecular
- xiv. Calor específico de gases
- xv. Ressonância magnética nuclear e de spin eletrônico



Tópicos a serem Abordados

3) Teoria do Funcional da Densidade;

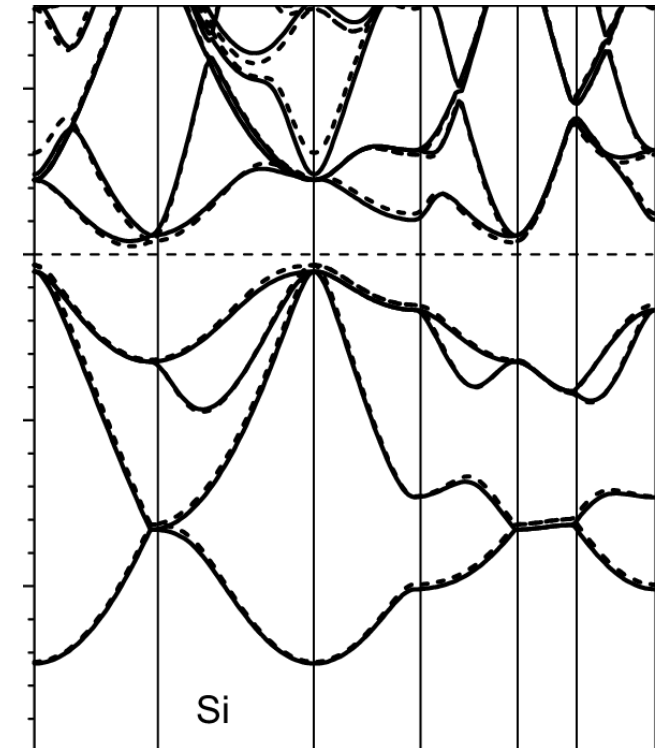
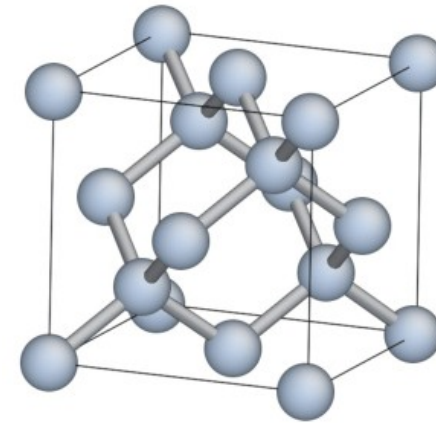
- i. Modelo de Thomas-Fermi
- ii. Teoremas de Kohn - Hohenberg
- iii. Cálculo Variacional
- iv. Orbitais de Kohn-Sham
- v. Funcionais de troca e correlação
- vi. Discussão sobre TDDF e outras formulações de DFT



Tópicos a serem Abordados

4) Estrutura Eletrônica de Sólidos;

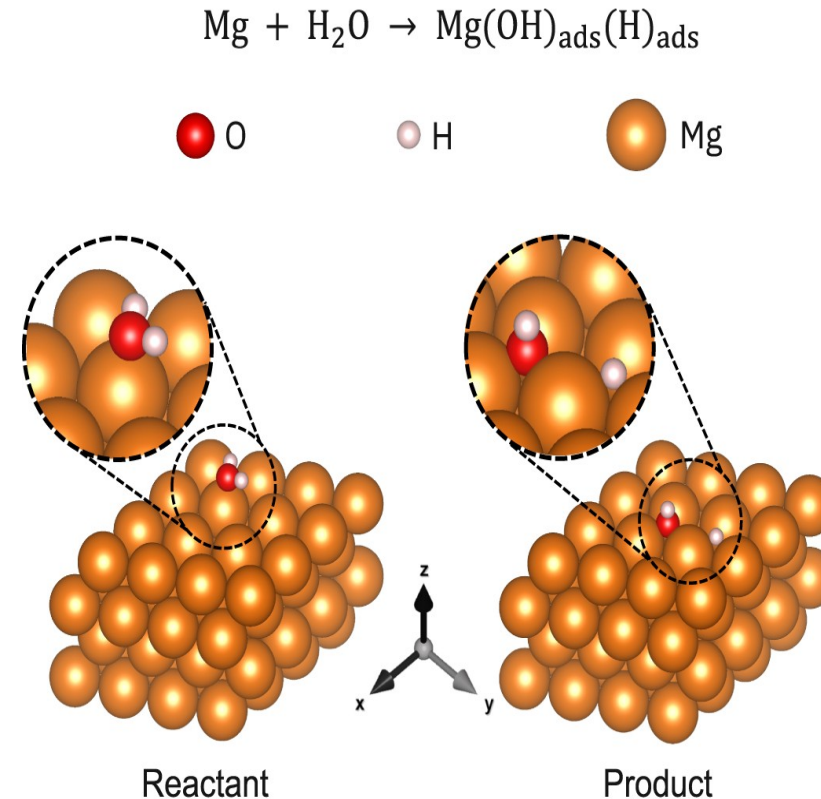
- i. Redes de Bravais, Estruturas Cristalinas
- ii. Rede Recíproca: 1ª zona de Brillouin, Índices de Miller
- iii. Difração de raios-X por cristais
- iv. Teorema de Bloch
- v. Densidade de Estados
- vi. Estrutura de Bandas
- vii. Discussão de métodos avançados: Método tight-binding, projetor de onda aumentada, pseudopotenciais
- viii. Propriedades óticas de sólidos
- ix. Vibrações cristalinas e fônons
- x. Espectro Raman de sólidos
- xi. Calor específico de sólidos



Tópicos a serem Abordados

5) Aplicações na Engenharia Química.

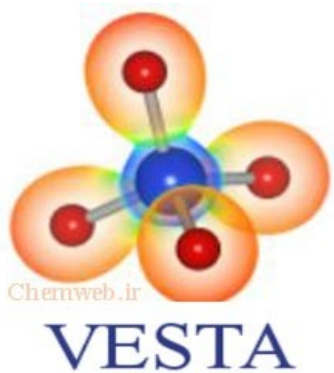
- i. Reação química
- ii. Adsorção
- iii. Catálise
- iv. Métodos para estados intermediários
- v. Cálculo de Espectros
- vi. Métodos de Dinâmica Ab-Initio



Relative electronic energy:

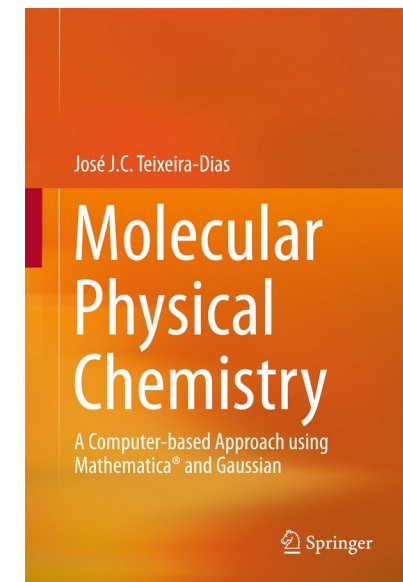
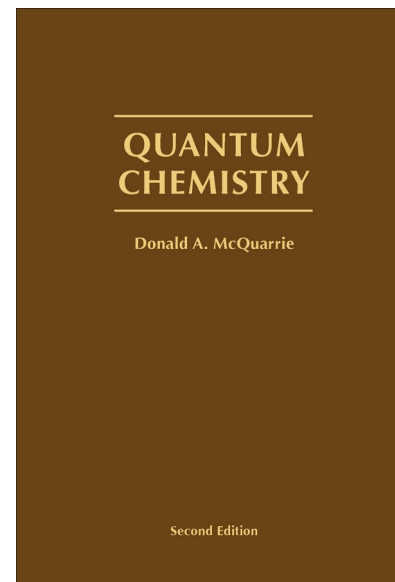
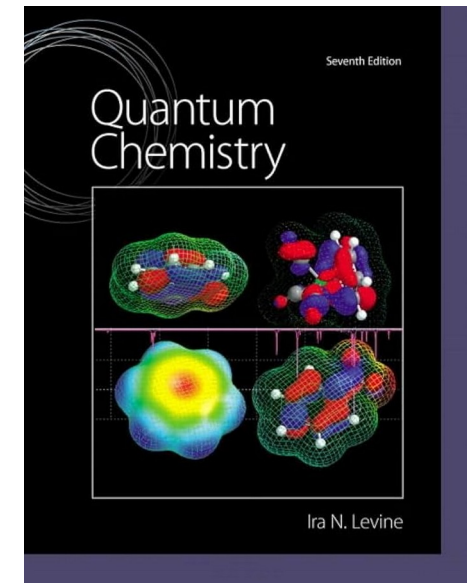
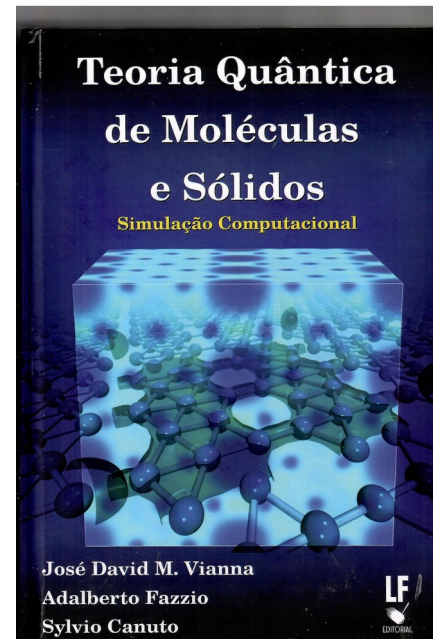
$$\Delta E = E_{\text{product}} - E_{\text{reactant}}$$

Ferramentas Computacionais



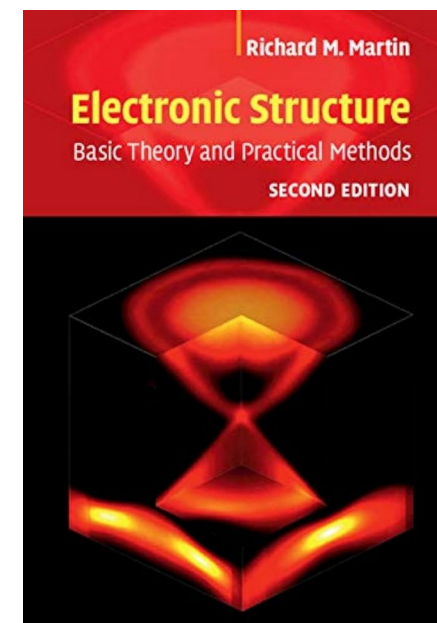
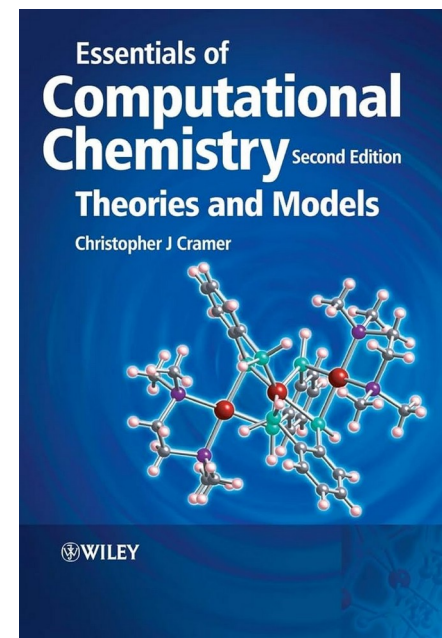
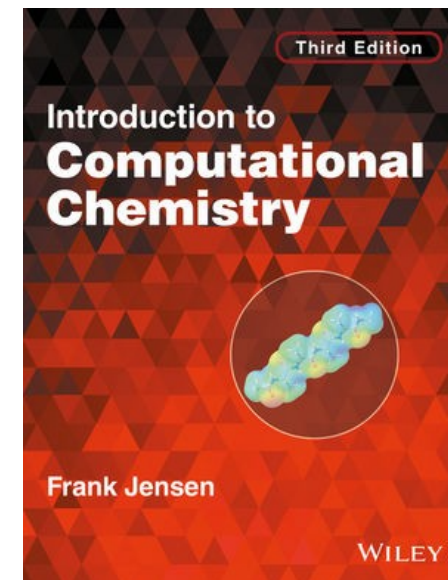
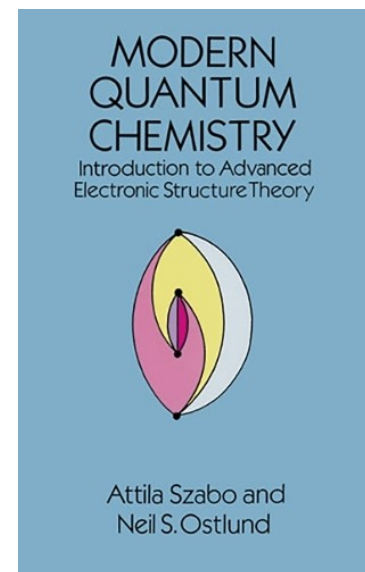
Referências

- Vianna, D. M., Fazzio, A., Canuto, S. (2018). **Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos: Simulação Computacional**. Livraria da Física.
- Levine, I. N. (2013). **Quantum Chemistry, 7th Edition**. Pearson
- McQuarrie, D. A. (2008). **Quantum chemistry, 2nd Edition**. University Science Books.
- Teixeira-Dias, J. J. (2017). **Molecular Physical Chemistry**. Springer International Publishing AG.



Referências

- Szabo, A., & Ostlund, N. S. (1996). **Modern quantum chemistry: introduction to advanced electronic structure theory**. Courier Corporation.
- Jensen, F. (2017). **Introduction to computational chemistry**. John Wiley & Sons.
- Cramer, C. J. (2013). **Essentials of computational chemistry: theories and models**. John Wiley & Sons.
- Martin, R. M. (2020). **Electronic structure: basic theory and practical methods**. Cambridge university press.



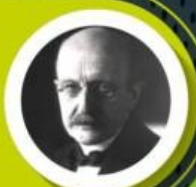
A EVOLUÇÃO DA FÍSICA QUÂNTICA

(1900 – 2025)

1900 Hipótese Quântica

Envolvido: Max Planck

Planck propôs que energia é emitida em pequenos pacotes, chamados quanta. Segundo a teoria, os quanta são os menores pacotes de energia existentes.



1905 Efeito Fotoelétrico

Envolvido: Albert Einstein

Einstein demonstrou que a luz é composta por partículas, que, posteriormente, ficaram conhecidas como fótons, propondo que a quantização apresentada por Planck era uma propriedade válida para todas as interações envolvendo radiação eletromagnética.

1913 Modelo Atômico de Bohr

Envolvido: Niels Bohr

Bohr propôs que os elétrons orbitam o núcleo do átomo em níveis de energia quantizados, abrindo caminho para a mecânica quântica.



1924 Dualidade Onda-Partícula

Envolvido: Louis de Broglie

De Broglie sugeriu que partículas, como os elétrons, podem apresentar um comportamento tanto de partícula, como de onda.

1925

Formulação da Mecânica Quântica

Envolvido: Werner Heisenberg

Heisenberg apresentou a mecânica matricial, que consistiu na primeira teoria geral dos fenômenos quânticos aceita pelos físicos.



1926

Equação de Schrödinger

Envolvido: Erwin Schrödinger

Schrödinger desenvolveu a mecânica ondulatória e descreveu como o estado quântico de um sistema físico muda com o tempo.



1927 Princípio da Incerteza

Envolvido: Werner Heisenberg

O princípio afirma que a posição e o momento de uma partícula não podem ser determinados com precisão simultaneamente. Ou seja, quanto mais uma propriedade é medida, menos se sabe da outra.



1935 Paradoxo EPR

Envolvidos: Einstein, Podolsky, Rosen

O paradoxo EPR questionou se a descrição da realidade a partir da mecânica quântica era completa. O trio apontou a possível existência de variáveis ocultas que deveriam ser consideradas e introduziram o conceito de emaranhamento quântico.



1981 Conceito de Computação Quântica

Envolvido: Richard Feynman
Feynman propôs utilizar a mecânica quântica para desenvolver computadores melhores e com maior capacidade de processamento: os computadores quânticos. Esse se tornou um dos principais desafios científicos e tecnológicos da contemporaneidade.



2001 Primeiro Algoritmo Quântico Demonstrado

Envolvidos: Pesquisadores da IBM

O algoritmo de Shor, demonstrou a viabilidade da computação quântica ao utilizar bits quânticos para a fatoração de números.

2019 Vantagem Quântica

Envolvidos:
Equipe Google AI Quantum

A Google anunciou que seu computador quântico superou a capacidade de um clássico em tarefas específicas.



2025 Ano Internacional da Ciência e Tecnologia Quânticas