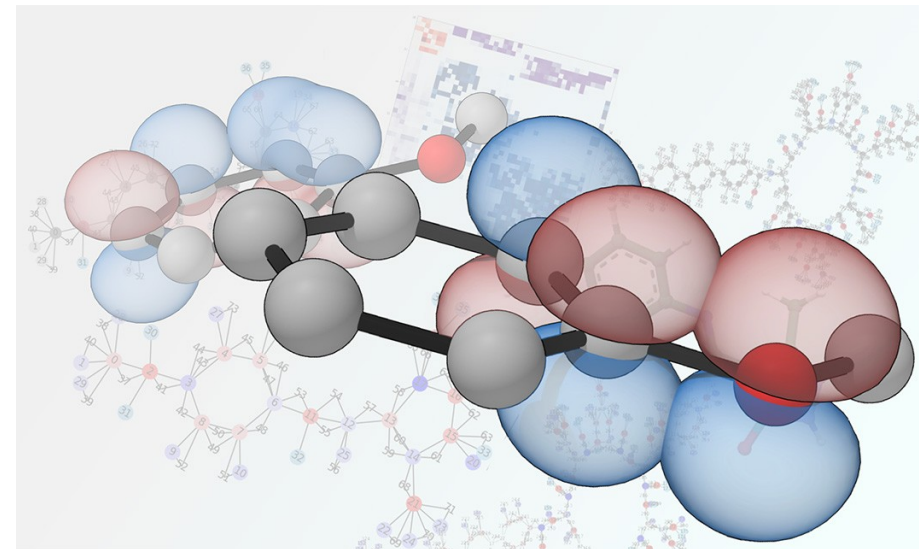


# Aula 01 – Apresentação do Curso

## Onde queremos chegar?



**Prof. Elvis Soares**  
[elvis@peq.coppe.ufrj.br](mailto: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:** G127

**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



<https://github.com/elvissoares/COQ875-QuimicaQuantica>



<https://elvissoares.com/ensino>

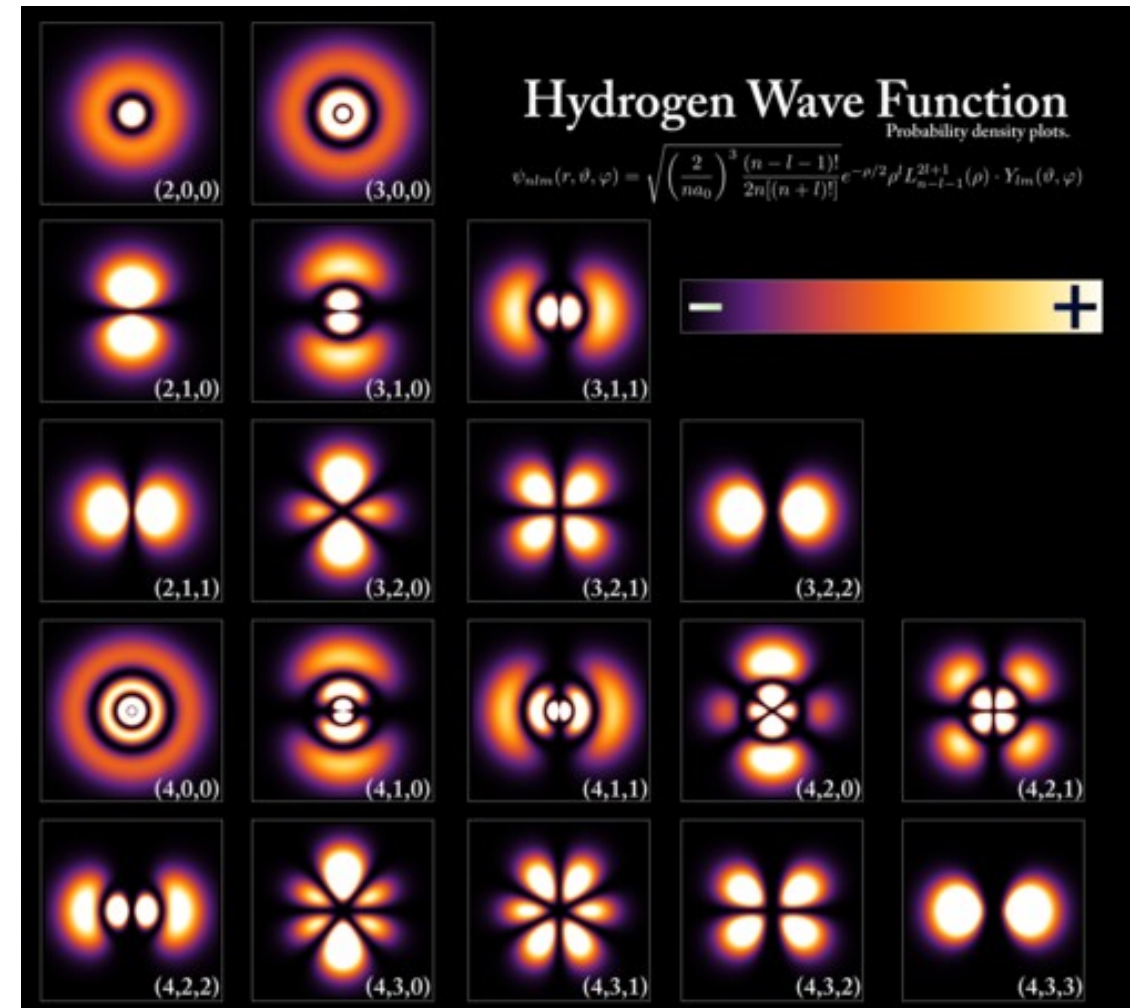
## EMENTA

- 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;

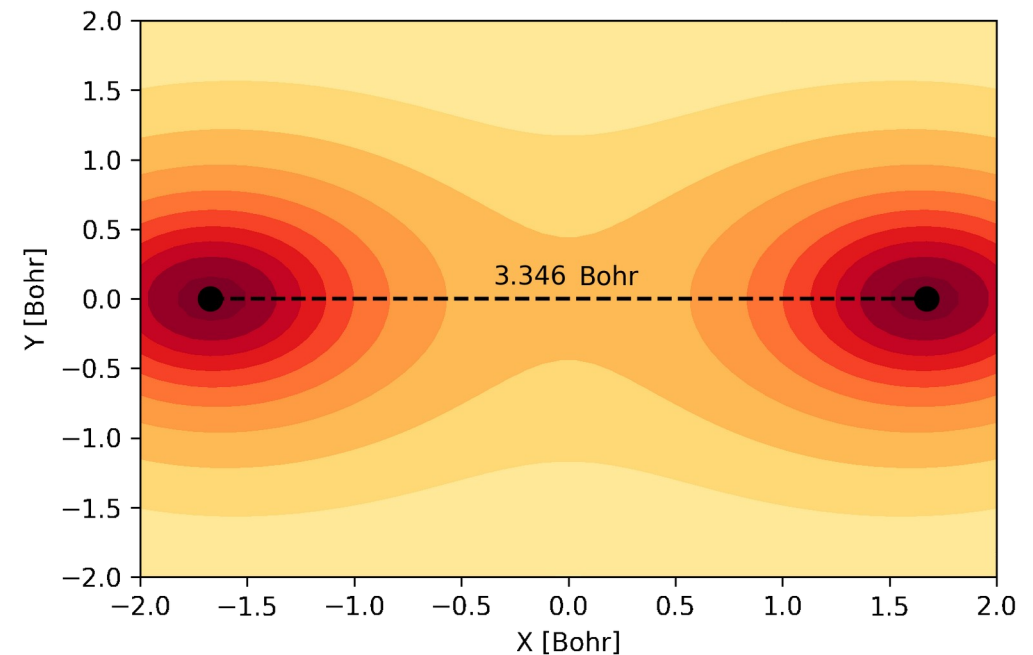
- i. Experimentos Fundadores da Mecânica Quântica
- ii. Bases Teóricas da Mecânica Quântica
- iii. Postulados da Mecânica Quântica
- iv. Operadores na Mecânica Quântica: posição, momento linear, momento angular e spin
- v. Álgebra de Operadores: Auto-valores, auto-vetores, mudança de base, comutadores
- 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;

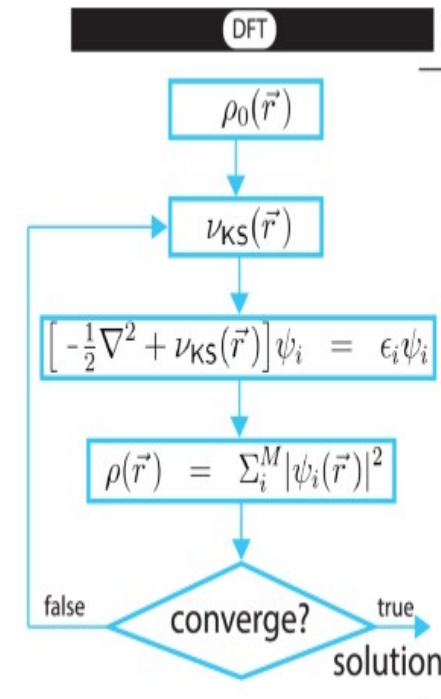
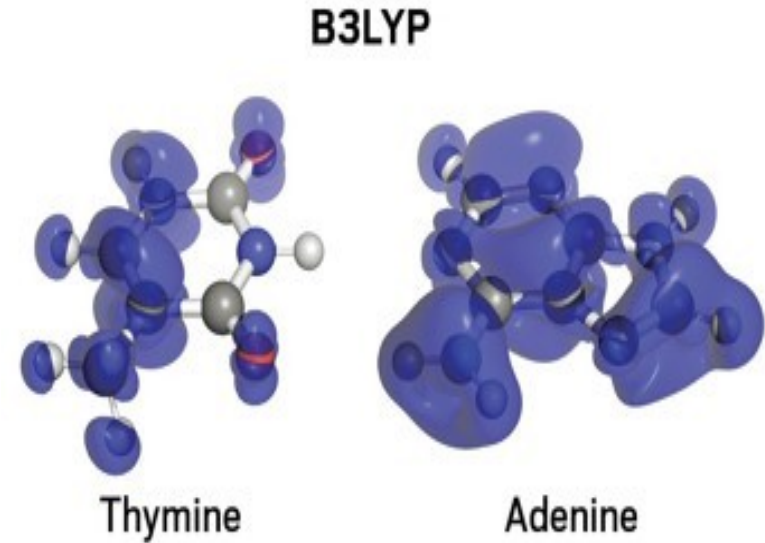
- i. O problema eletrônico
- ii. Aproximação de Born-Oppenheimer
- iii. Teorema Variacional: aplicação no Átomo de He e molécula de H<sub>2</sub>
- iv. Determinante de Slater
- v. Método de Hartree-Fock
- vi. Conjunto de Base
- vii. Equações de Roothan e método auto-consistente
- viii. Discussão de métodos 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;

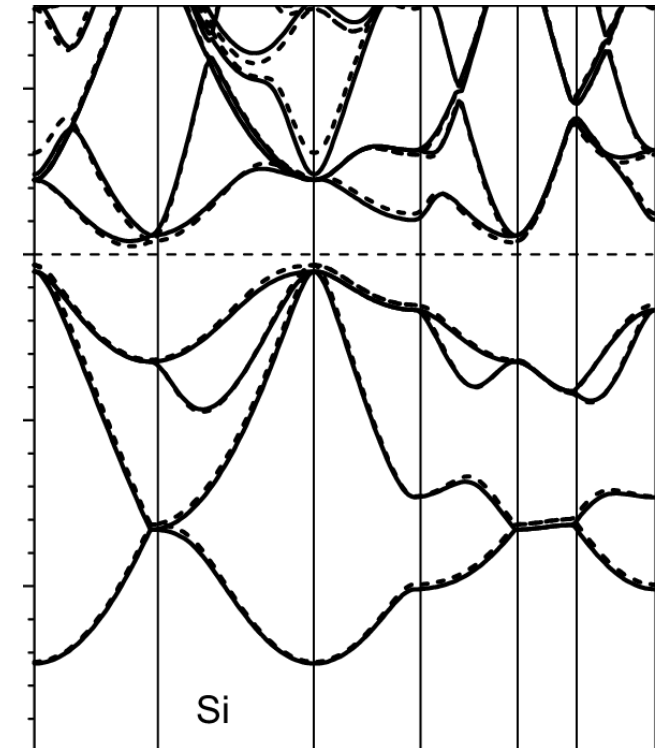
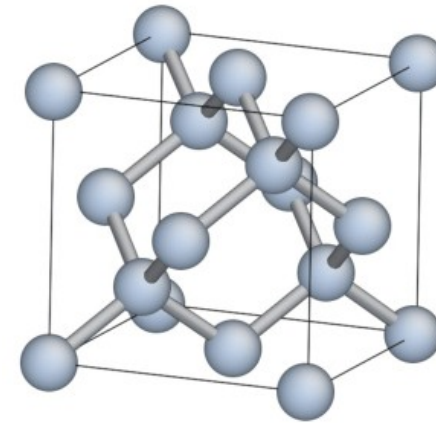
- i. Modelo de Thomas-Fermi
- ii. Teoremas de Kohn - Hohenberg
- iii. Cálculo Variacional
- iv. Orbitais de Kohn-Sham
- v. Funcionais de troca e correlação
- vi. Discussão sobre TDDF e outras formulações de DFT



# 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

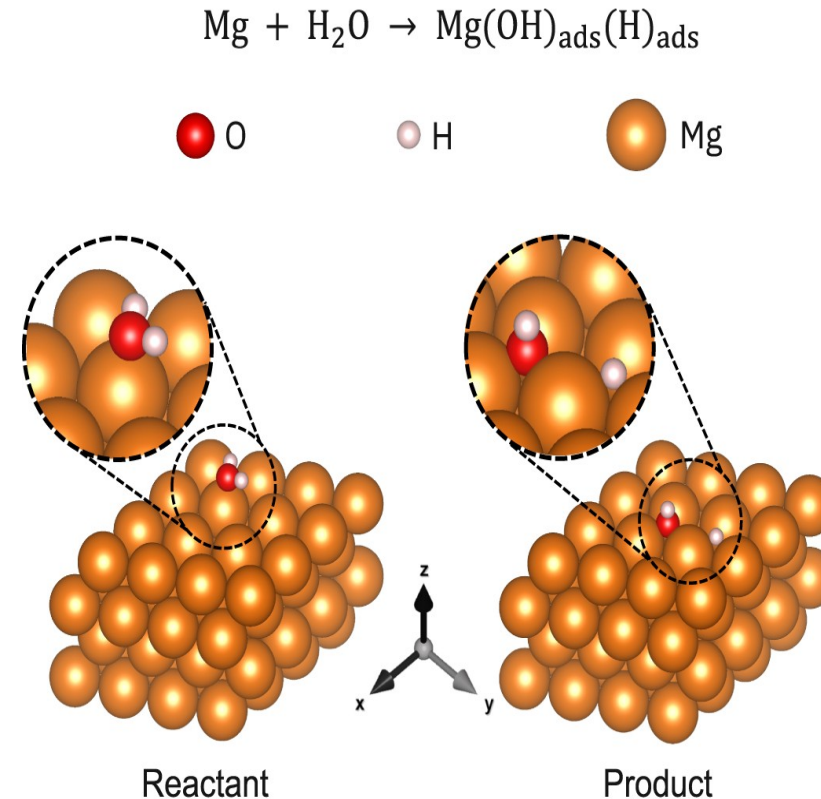




# Tópicos a serem Abordados

## 5) Aplicações na Engenharia Química.

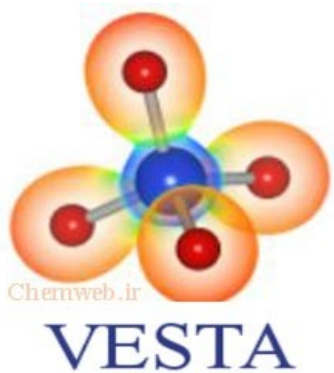
- i. Reação química
- ii. Adsorção
- iii. Catálise
- iv. Métodos para estados intermediários
- v. Cálculo de Espectros
- vi. Métodos de Dinâmica Ab-Initio



Relative electronic energy:

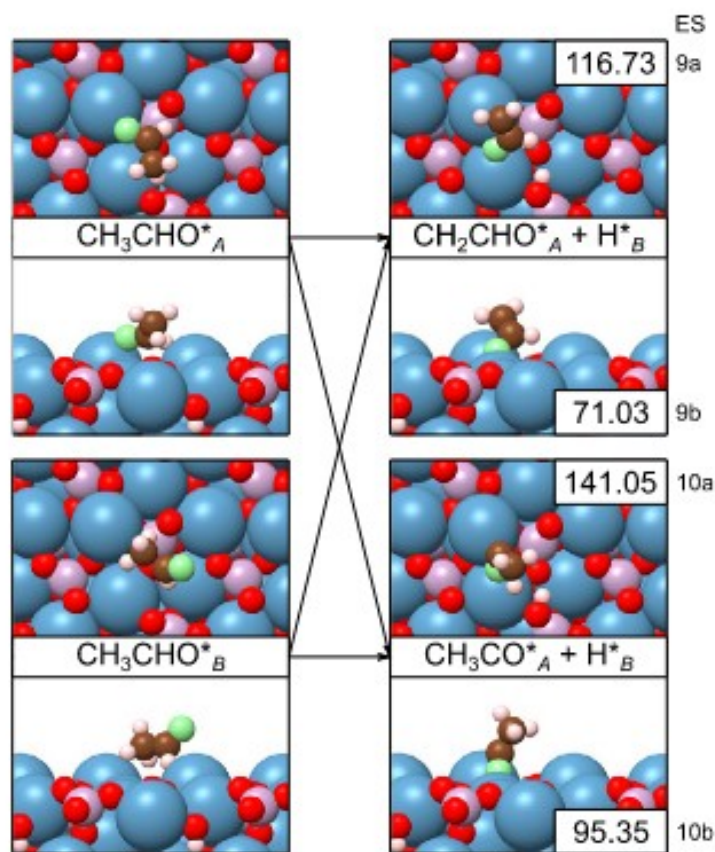
$$\Delta E = E_{\text{product}} - E_{\text{reactant}}$$

# Ferramentas Computacionais





# Contexto



Brasil, H., Bittencourt, A. F. B., Yokoo, K. C. E. S., Mendes, P. C. D., Verga, L. G., Andriani, K. F., Landers, R., Da Silva, J. L. F., & Valença, G. P. (2021). Synthesis modification of hydroxyapatite surface for ethanol conversion: The role of the acidic/basic sites ratio. *Journal of Catalysis*, 404, 802–813. <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2021.08.050>

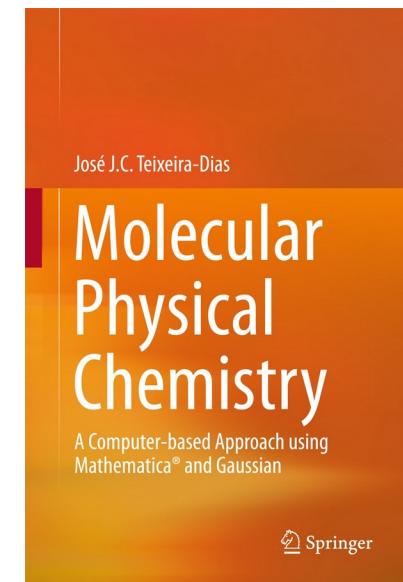
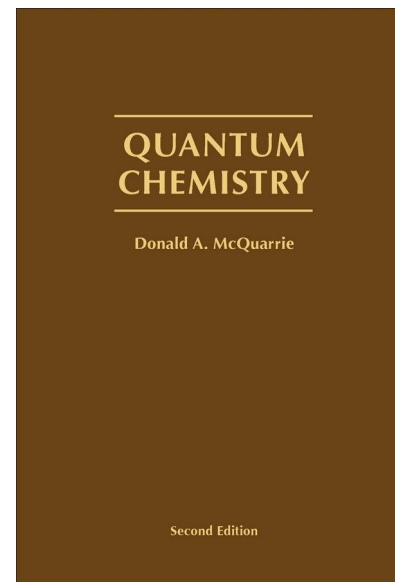
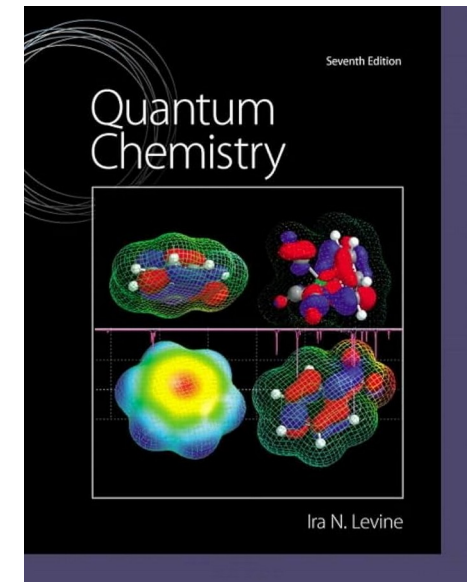
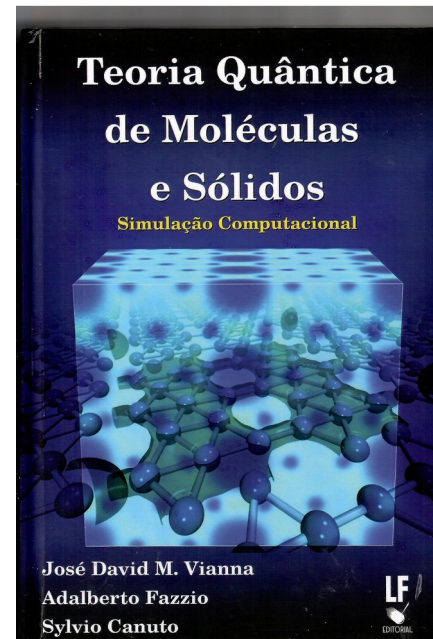
## 2.3. Theoretical calculations

All total energy calculations were based on spin-polarized DFT [45,46] adopting the semilocal Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) formulation for the exchange–correlation functional [47]. The semi-empirical D3 van der Waals (vdW) correction proposed by Grimme [48] was used to improve the description of long-range vdW interactions. We employed the Vienna *ab initio* simulation package (VASP), version 5.4.1, which implements the all-electron projected augmented-wave (PAW) method [49–52]. The electron–ion interactions were described by the PAW projectors provided within VASP along with a plane-wave cutoff energy of 489 eV, which is 12.5% higher than the largest recommended value considering all chemical elements (C, Ca, H, O, and P).

The initial geometries of the isolated gas-phase molecules were obtained from the PubChem database [53] and optimized using a 20 Å cubic box. The clean hexagonal HAP(0001) surface was modeled using a repeated slab geometry with a thickness of four layers (one formula unit,  $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH})$ , per layer and Ca/P ratio of 1.67), and a vacuum region of 15 Å. To search for the lowest energy configurations, 30 distinct structures were built for each adsorbed system using a  $1 \times 1$  surface unit cell with  $a_0 = b_0 = 9.497 \text{ Å}$  (88 atoms within the unit cell). The adsorption structures were built by symmetrically placing adsorbates on both sides of the slab with respect to its center of inversion. As a result, dipole correction was no longer required. Once the lowest energy configurations were identified, the optimized adsorbed structures were placed on the surface  $2 \times 2$  unit cell ( $a_0 = b_0 = 18.995 \text{ Å}$ , 352 atoms within the unit cell) for a final structure optimization. All optimized structures were calculated allowing all atoms to relax through the conjugate gradient algorithm. The total energy convergence criterion was set to  $10^{-5} \text{ eV}$  with a force convergence of  $0.025 \text{ eV Å}^{-1}$  on each atom. Only the  $\Gamma$ -point was employed for the Brillouin zone integration.

# Referências

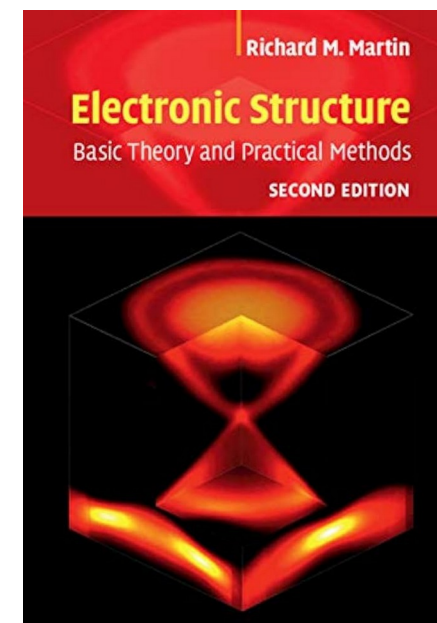
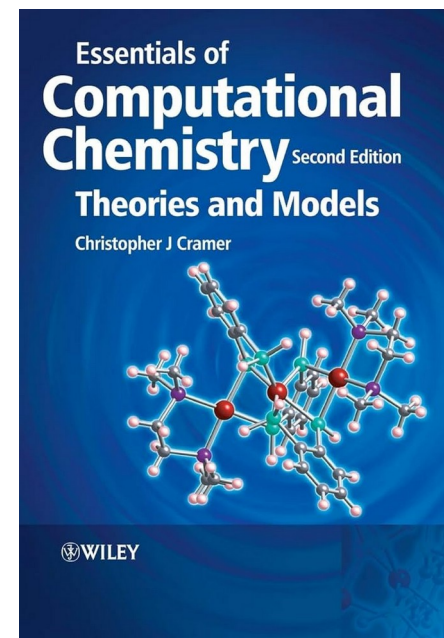
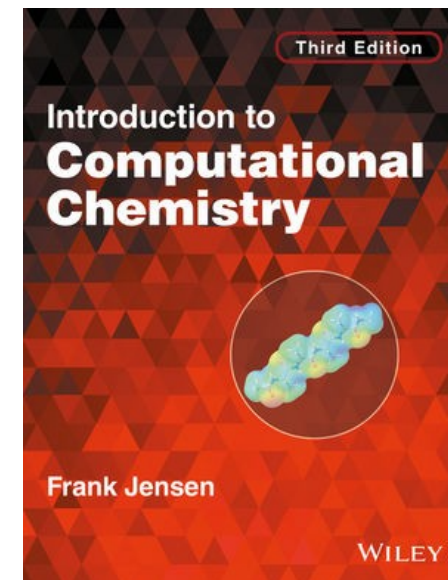
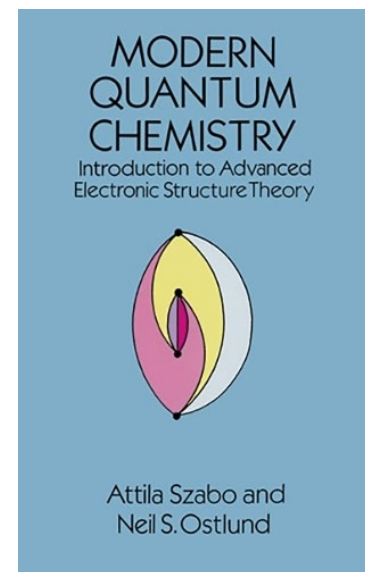
- Vianna, D. M., Fazzio, A., Canuto, S. (2018). **Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos: Simulação Computacional**. Livraria da Física.
- Levine, I. N. (2013). **Quantum Chemistry, 7th Edition**. Pearson
- McQuarrie, D. A. (2008). **Quantum chemistry, 2nd Edition**. University Science Books.
- Teixeira-Dias,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