

COQ-875– Química Quântica para Moléculas e Sólidos

CARÁTER: Eletiva

CARGA HORÁRIA: 45 horas

CRÉDITOS: 03

PRÉ-REQUISITOS: COQ-760 – Métodos Matemáticos em Engenharia Química I

RESPONSÁVEL: Prof. Elvis do A. Soares

OBJETIVOS

Aprofundamento dos conceitos teóricos e métodos computacionais para a resolução de problemas envolvendo química quântica e suas aplicações em sistemas moleculares, sólidos e interfaces.

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.

PROGRAMA

1. Fundamentos da Mecânica Quântica
 - 1.1. Experimentos fundadores
 - 1.2. Postulados da Mec. Quântica
 - 1.3. Auto-valores, auto-vetores, mudança de base, comutadores
 - 1.4. Operadores: posição, momento linear, momento angular e spin
 - 1.5. Eq. De Schroedinger
 - 1.6. Aplicações: Poço Quadrado, Tunelamento, Rotor rígido, Oscilador harmônico
 - 1.7. Átomo de Hidrogênio
2. Estrutura Eletrônica de Átomos e Moléculas

- 2.1. Teorema Variacional: aplicação no Átomo de He
 - 2.2. Aproximação de Born-Oppenheimer: aplicação na Molécula de H2
 - 2.3. Determinante de Slater
 - 2.4. Método de Hartree-Fock
 - 2.5. Conjunto de Base
 - 2.6. Equações de Roothan e método auto-consistente
 - 2.7. Discussão de métodos pós-HF e semi-empíricos
 - 2.8. Cálculos computacionais usando ASE e PySCF
 - 2.9. Densidade eletrônica, momento de dipolo elétrico e polarizabilidade
 - 2.10. Interação da radiação com moléculas
 - 2.11. Espectro micro-ondas e a rotação molecular
 - 2.12. Espectro IR e Raman e a vibração molecular
 - 2.13. Calor específico de gases
 - 2.14. Ressonância magnética nuclear e de spin eletrônico
- 3. Teoria do Funcional da Densidade
 - 3.1. Modelo de Thomas-Fermi
 - 3.2. Teoremas de Kohn - Hohenberg
 - 3.3. Cálculo Variacional
 - 3.4. Orbitais Kohn-Sham
 - 3.5. Funcionais de troca e correlação
 - 3.6. Discussão sobre TDDFT
 - 3.7. Cálculos computacionais usando Quantum Espresso e GPAW
- 4. Estrutura Eletrônica de Sólidos
 - 4.1. Redes Cristalinas
 - 4.2. Rede Recíproca: 1^a zona de Brillouin, Índices de Miller
 - 4.3. Difração de raios-X por cristais
 - 4.4. Teorema de Bloch
 - 4.5. Densidade de Estados
 - 4.6. Estrutura de Bandas
 - 4.7. Discussão de métodos avançados: tight binding, projetor de onda aumentada, pseudopotenciais
 - 4.8. Propriedades óticas de sólidos
 - 4.9. Vibrações da rede e fônons
 - 4.10. Espectro Raman de sólidos
 - 4.11. Calor específico de sólidos
 - 4.12. Cálculos computacionais usando Quantum Espresso e GPAW
- 5. Aplicações Computacionais na Engenharia Química
 - 5.1. Reação química
 - 5.2. Adsorção e Catálise
 - 5.3. Cálculo de Espectros
 - 5.4. Dinâmica Molecular Car-Parrinello

5.5. Métodos avançados: método de nudged elastic band (NEB), análise de Bader, densidade de estados projetada.

MÉTODO DE TRABALHO: aulas teórico-práticas em sala-de-aula e laboratório de computação com realização de exercícios em aula e listas de exercício extra-classe. Utilização de softwares livres como ASE, PySCF, GPAW e Quantum ESPRESSO.

CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO: avaliação baseada em listas de exercícios extra-classe e projetos de final de curso.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 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*: International Edition.
- McQuarrie, D. A. (2008). *Quantum chemistry*. University Science Books.
- Teixeira-Dias, J. J. (2017). *Molecular Physical Chemistry*. Springer International Publishing AG.
- 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.