

FICHA DE DISCIPLINA DE PÓS-GRADUAÇÃO

Sigla e título:	FQ-294 / 2020 Introdução à Estrutura Eletrônica
Acronym and title:	FQ-294 / 2020 Introduction to Electronic Structure

Ementa:	
Modelagem de sistemas em mecânica clássica. Problemas da física clássica no final do século XIX. Equação de onda clássica e quântica. Interpretação de Copenhagen. Exemplos de potenciais com solução analítica. Átomos multieletrônicos e orbitais atômicos. Moléculas e aproximação de Born-Oppenheimer. Orbitais moleculares. Curvas de energia potencial. Formação de bandas. Ligação química de metais simples e do grupo principal. Metais de transição e tendências na tabela periódica. Química computacional: espectroscopia, reatividade e estabilidade de sistemas moleculares.	
Syllabus:	
Modelling systems in classical mechanics. Problems of classical physics in the late nineteenth century. Classical and quantum wave equation. Copenhagen interpretation. Examples of potentials with analytical solution. Multielectronic atoms and atomic orbitals. Molecules and the Born-Oppenheimer approximation. Molecular orbitals. Potential energy curves. Formation of energy bands. Chemical bonding of simple metals and main group elements. Transition metals and trends in the periodic table. Computational chemistry: spectroscopy, reactivity and stability of molecular systems.	

Carga horária semanal	2-0-1-3	Crédito máximo	3
------------------------------	---------	-----------------------	---

Requisitos	Recomendado	Não há
	Exigido	Não há

Bibliografia recomendada	
1	LEVINE, I. N. Physical Chemistry . 6 ed. McGraw-Hill Science, 2009.
2	Piela, L. Ideas of quantum chemistry . 2 ed. Elsevier, 2014.
3	McQUARRIE, D. A. Quantum Chemistry . 2 ed. University Science Books, 2008.

Responsável pela ementa	Luiz Fernando de Araujo Ferrão
--------------------------------	--------------------------------