ÍNDICE

PREFÁCIO
BIBLIOGRAFIA
GENÉRICO
INTRODUÇÃO

I INTRODUÇÃO ÀS IDEIAS FUNDAMENTAIS DA MECÂNICA QUÂNTICA

1 ONDAS E PARTÍCULAS IDEIAS FUNDAMENTAIS DA MECÂNICA QUÂNTICA
1.1 Introdução
1.2 Ondas Electromagnéticas e Fotões
1.3 Fotões e Estados Quânticos
1.4 Partículas Materiais e Ondas de Matéria. Relação de de Broglie
1.4.1 Difracção de Electrões
1.5 Equação de Schrödinger. Funções de Onda
COMPLEMENTOS DO CAPÍTULO 1
1A Quanta de Radiação
1B Quanta de Luz como Partículas. Efeito Fotoeléctrico e Efeito de Compton
1C Relação de de Broglie
1D Algumas Reßexões Adicionais sobre a Dualidade Onda-partícula
1E Problemas

2 SOLUÇÕES DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER.EXEMPLOS SIMPLES
2.1 Partícula Livre
2.2 Partícula numa Caixa
2.3 Efeito de Túnel

COMPLEMENTOS DO CAPÍTULO 2
2A Problemas

II FORMALISMO DA MECÂNICA QUÂNTICA

3 FORMALISMO DA MECÂNICA QUÂNTICA
3.1 Introdução
3.2 Funções de Onda e Estados Quânticos
3.2.1 Espaço das Funções de Onda
3.2.2 Espaço dos Estados
3.3 Observáveis
3.3.1 Operadores Lineares e Hermitianos
3.3.2 Operadores de Projecção
3.3.3 Valores Próprios e Vectores Próprios de Operadores Lineares Hermitianos
3.3.4 Comutatividade e Compatibilidade
3.3.5 Traços de Matrizes e de Operadores
3.3.6 Produto Tensorial de Espaços de Estados e Respectivos Operadores

3.3.7 Extensão de Operadores
3.3.8 SigniÞcado Físico de Um Estado Que É Um Produto Tensorial
3.3.9 SigniÞcado Físico de Um Estado Que Não É Um Produto Tensorial
3.4 Processos Físicos
3.4.1 Previsão de Resultados de Medições ou Observações
3.4.2 Relações de Incerteza
3.5 Postulados da Teoria Quântica
3.6 Matriz Densidade
3.6.1 Introdução
3.6.2 Operador Densidade
3.6.3 Estados Puros e Misturas Estatísticas
3.6.4 Matriz Densidade de Um Sistema Múltiplo
3.6.5 Processos Físicos, Entrelaçamento e Descoerência

COMPLEMENTOS DO CAPÍTULO 3
3A Alguns Aspectos Adicionais do Formalismo
3B Paradoxo de EPR
3C Problemas

III MECÂNICA QUÂNTICA NA QUÍMICA

4 OSCILADOR HARMÓNICO LINEAR. VIBRAÇÕES MOLECULARES
4.1 Vibrações em Moléculas Diatómicas
4.2 Equação de Schrödinger
4.3 Modos Normais
COMPLEMENTOS DO CAPÍTULO 4
4A Problemas
5 ÁTOMO DE HIDROGÉNIO
5.1 Introdução
5.2 Equação de Onda a Três Dimensões. Momento Angular
5.2.1 Separação da Equação
5.2.2 Equação Harmónica Esférica
5.3 Equação Radial
5.4 Funções de Onda dos Átomos Hidrogenóides
5.5 Momentos Magnéticos Orbitale de Spin
5.5.1 A Famosa Experiência de Stern e Gerlach
5.5.2 Spin do Electrão

COMPLEMENTOS DO CAPÍTULO 5
5A Spin e Simetria das Funções de Onda. Partículas Idênticas 165 5B Problemas

6 MÉTODOS APROXIMADOS DE RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER
6.1 Método Variacional
6.1.1 Aplicação a Funções Expressas como Combinações Lineares de Outras Funções.
Minimização da Energia pelo Método dos Multiplicadores de Lagrange

6.1.2 Extensão do Método Variacional a Estados Excitados
6.2 Teoria das Perturbações Independentes do Tempo
6.2.1 Caso de Estados Não Degenerados
6.2.2 Caso de Estados Degenerados

COMPLEMENTOS DO CAPÍTULO 6
6A Espectroscopias de Ressonância Magnética Electrónica e de Ressonância Magnética Nuclear para o Átomo de Hidrogénio
6B Problemas

7 TEORIA DAS ORBITAIS
7.1 Introdução
7.2 Hamiltoniano
7.3 Função de Onda
7.4 Expressões da Energia. Aproximação de Hartree-Fock
7.5 Parâmetros Variacionais. Aproximação das Combinações Lineares
7.5.1 Aproximação das Combinações Lineares
7.5.2 Bases das Combinações Lineares
7.5.3 Expressões da Energia na Base das Combinações Lineares
7.5.4 Cálculo das Energias das Orbitais e dos CoeÞcientes das Combinações Lineares
7.6 Método do Campo Autocoerente (SCF). Cálculos Ab Initio
7.7 Análise de Populações Electrónicas
7.7.1 Método de Mulliken
7.7.2 Método de Löwdin
7.7.3 Análise da Estrutura de Lewis
7.8 Correlação Electrónica. Métodos Pós-Hartree-Fock
7.8.1 Método da Interacção de ConÞgurações (CI)
7.8.2 Métodos Perturbacionais. Teoria das Perturbações de Møller-Plesset
7.9 Métodos Semiempíricos
7.9.1 Método de Hückel Simples
7.9.2 Método de Hückel Estendido
7.9.3 Método de Pariser-Parr-Pople (PPP)
7.9.4 Métodos de CNDOe INDO
7.9.5 Métodos Paramétricos (MINDO, MNDO, AM1, PM3, SAM1e MINDO/d)
7.10 Teoria do Funcional da Densidade
7.11 Comparação de Métodos e Futuro da Química Quântica
7.11.1 Breve Comparação dos Métodos mais Comuns
7.11.2 O Futuro da Química Quântica

COMPLEMENTOS DO CAPÍTULO 7
7A Átomo de Hélio — Uma Primeira Aproximação
7B Átomo de Hélio em Aproximações SCF-LCBF
7C Ião H+
7D Molécula HeH+
7E Cálculo de Hartree-Fock para a Molécula H2O

7F Método de Hückel Simples
7G Problemas

A APÊNDICES
A1 Operadores do Momento Angular para Sistemas de Muitos Electrões
A2 Aproximações Adiabática e de Born-Oppenheimer
A3 Séries de Fourier e Transformadas de Fourier
A4 Função ?de Dirac
A5 Integral de Repulsão entre Dois Electrões
A6 Sistema Internacional de Unidades (SIou mks)
A7 Unidades Atómicas

FORMULÁRIO
SOLUÇÕES E SUGESTÕES PARA ALGUNS PROBLEMAS
ÍNDICE REMISSIVO