



Universidade Federal  
de São João del-Rei

## COORDENADORIA DO CURSO DE QUÍMICA

### PLANO DE ENSINO

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                 |                          |                                                       |                 |              |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------|--------------------------|-------------------------------------------------------|-----------------|--------------|
| Unidade Curricular: QUÍMICA QUÂNTICA E ESPECTROSCOPIA                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |                 |                          | Período: 6º                                           | Currículo: 2019 |              |
| Docente: Josefredo R. Pliego Jr.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                 |                          | Unidade Acadêmica: DCNAT                              |                 |              |
| Pré-requisito: EQUAÇÕES DIFERENCIAIS<br>FUNDAMENTOS DE QUÍMICA QUÂNTICA                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |                 |                          | Co-requisito: -                                       |                 |              |
| C.H. Total: 66 h-72ha                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | C.H. Prática: - | C. H. Teórica: 66 h-72ha | Grau: Bacharelado                                     | Ano: 2026       | Semestre: 2º |
| EMENTA                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                 |                          |                                                       |                 |              |
| Postulados e Princípios da Mecânica Quântica. Método Variacional. Átomos multieletrônicos. Ligação Química. Transições radiativas. Espectroscopia Rotacional. Espectroscopia Vibracional. Espectroscopia Eletrônica. Ressonância Magnética Nuclear. Lasers. Fotoquímica. Química Computacional.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                 |                          |                                                       |                 |              |
| OBJETIVOS                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |                 |                          |                                                       |                 |              |
| Dominar, do ponto de vista da Mecânica Quântica, os princípios fundamentais envolvidos no estudo da estrutura atômica e molecular. Compreender os conceitos físico-químicos relativos à interação da radiação com a matéria e sua aplicação em espectroscopia atômica e molecular. Conhecer os fundamentos dos principais métodos espectroscópicos utilizados na Química moderna.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                 |                          |                                                       |                 |              |
| CONTEÚDO PROGRAMÁTICO                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |                 |                          |                                                       |                 |              |
| <ul style="list-style-type: none"><li>- Métodos de aproximação: Princípio variacional e teoria de perturbação</li><li>- Átomos multieletrônicos: campo médio e orbitais, método de Hartree, spin, antissimetria da função de onda, método de Hartree-Fock, Termos atômicos</li><li>- Moléculas e Ligação química: Aproximação de Born-Oppenheimer, teoria de orbitais moleculares, método de Huckel</li><li>- interação da radiação com a matéria: equação de Schrodinger dependente do tempo</li><li>- espectroscopia rotacional: diatômicas e poliatômicas</li><li>- espectroscopia vibracional: diatômicas, anarmonicidade, poliatômicas e modos normais.</li><li>- Espectroscopia eletrônica: transições eletrônicas, princípio de Franck-Condon.</li><li>- Fotoquímica: decaimentos radiativo e não radiativo.</li><li>- Química computacional: mecânica molecular, matriz Z, Método de Hartree-Fock e funções de base, orbitais canônicos e localizados, cargas atômicas, otimização de geometria, frequências harmônicas, análise conformacional.</li></ul> |                 |                          |                                                       |                 |              |
| METODOLOGIA DE ENSINO E RECURSOS AUXILIARES                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |                 |                          |                                                       |                 |              |
| A unidade curricular será ministrada através de aulas expositivas, aulas de exercícios, práticas no computador e trabalhos em grupo                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |                 |                          |                                                       |                 |              |
| FORMA E CRONOGRAMA DE AVALIAÇÃO                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                 |                          |                                                       |                 |              |
| A avaliação será feita através de duas provas escritas, correspondendo a 70% da nota (35% a primeira e 35% a segunda), e trabalhos em grupo, incluindo prática no computador, correspondendo a 30% da nota final. Haverá uma avaliação substitutiva, com todo o conteúdo do curso, que substituirá a prova de menor nota, somente se a nota da prova substitutiva for maior. Todo aluno com média maior ou igual a quatro tem a opção de fazer ou não a prova substitutiva.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |                 |                          |                                                       |                 |              |
| BIBLIOGRAFIA BÁSICA                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |                 |                          |                                                       |                 |              |
| Ball, D. W. <i>Físico-Química</i> , vol. 1-2, Pioneira Thomson Learning: São Paulo, 2006.<br>McQuarrie, D. A. <i>Physical Chemistry, A Molecular Approach</i> , University Science Books, Sausalito, 1998.<br>Sala, O. <i>Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho</i> , 2ª ed., Editora da Unesp: São Paulo, 2012.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                 |                          |                                                       |                 |              |
| BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |                 |                          |                                                       |                 |              |
| Atkins, P. W.; Paula, J. <i>Físico-Química</i> , 9ª ed., vol. 1-2, LTC: Rio de Janeiro, 2012.<br>Trsic, M.; Pinto, M. F. S. <i>Química Quântica: Fundamentos e Aplicações</i> . Barueri: Manole, 2009.<br>Levine, I. N. <i>Físico-Química</i> , 6ª ed., vol. 1-2, LTC: Rio de Janeiro, 2012.<br>Alcacer, L. <i>Introdução à Mecânica Quântica</i> , Editora Livraria da Física: São Paulo, 2012.<br>Steinfeld, J. I. <i>Molecules and Radiation: An Introduction to Modern Molecular Spectroscopy</i> , 2ª ed., Dover: New York, 2005.<br>Harris, D. C.; Bertolucci, M. D. <i>Symmetry and Spectroscopy – An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy</i> , Dover: New York, 1978.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                 |                          |                                                       |                 |              |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                 |                          | Aprovado pelo Colegiado em        /        /        . |                 |              |



Documento assinado digitalmente  
**JOSEFREDO RODRIGUEZ PLIEGO JUNIOR**  
Data: 06/07/2026 10:42:27-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Docente Responsável



Documento assinado digitalmente  
**STELLA MARIS RESENDE**  
Data: 07/07/2026 18:39:10-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Coordenador do Curso