



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: Stella Maris Resende

Unidade Acadêmica: DCNAT

Pré-requisito: EQUAÇÕES DIFERENCIAIS
FUNDAMENTOS DE QUÍMICA QUÂNTICA

Co-requisito: -

C.H. Total: 66 h-72 ha

C.H. Prática: -

C. H. Teórica: 66 h-72 ha

Grau: Bacharelado

Ano: 2020

Semestre: Emergencial

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

Estrutura Atômica: Átomos multieletrônicos; Métodos de aproximação.
Estrutura Molecular: Aproximação de Born-Oppenheimer; Teoria de Orbitais Moleculares; Química Computacional.
Espectroscopia Rotacional e Vibracional: Absorção e emissão de radiação; Espectro Rotacional; Espectroscopia no Infravermelho e Raman.
Espectroscopia Eletrônica: Estados eletrônicos excitados; Transições eletrônicas; Lasers; Fotoquímica.
Espectroscopia Magnética: Ressonância de Spin Eletrônico; Ressonância Magnética Nuclear.

METODOLOGIA DE ENSINO E RECURSOS AUXILIARES

A disciplina será conduzida por meio de aulas expositivas dialogadas on-line (52h) e realização de atividades não presenciais pelos discentes (14h). As aulas on-line serão ministradas com uso das plataformas Meet e Zoom, sendo necessário acesso à internet para participação. O Portal Didático da UFSJ será utilizado para envio de material de apoio e das atividades a serem realizadas de forma não presencial (listas de exercícios e trabalhos).

FORMA E CRONOGRAMA DE AVALIAÇÃO

Serão realizadas 4 avaliações on-line no decorrer do semestre, na 4ª, 7ª, 10ª e 12ª semanas letivas do período emergencial, com valor de 2,0 pontos cada uma. Haverá, ainda 2 trabalhos individuais, a serem entregues ao final da 7ª e da 12ª semanas letivas, cada um deles valendo 1,0 ponto. Serão considerados aprovados os discentes que obtiverem nota igual ou superior a 6,0 na soma destas 6 avaliações. Uma prova substitutiva, versando sobre todo o conteúdo programático, será aplicada ao final do semestre para todos os estudantes que desejarem, cuja nota substituirá a menor nota obtida dentre as 4 avaliações on-line, caso seja maior.

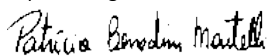
BIBLIOGRAFIA BÁSICA

Ball, D. W. *Físico-Química*, vol. 1-2, Pioneira Thomson Learning: São Paulo, 2006.
McQuarrie, D. A. *Physical Chemistry, A Molecular Approach*, University Science Books, Sausalito, 1998.
Sala, O. *Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho*, 2ª ed., Editora da Unesp: São Paulo, 2012.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

Atkins, P. W.; Paula, J. *Físico-Química*, 9ª ed., vol. 1-2, LTC: Rio de Janeiro, 2012.
Trsic, M.; Pinto, M. F. S. *Química Quântica: Fundamentos e Aplicações*. Barueri: Manole, 2009.
Levine, I. N. *Físico-Química*, 6ª ed., vol. 1-2, LTC: Rio de Janeiro, 2012.
Alcacer, L. *Introdução à Mecânica Quântica*, Editora Livraria da Física: São Paulo, 2012.
Steinfeld, J. I. *Molecules and Radiation: An Introduction to Modern Molecular Spectroscopy*, 2ª ed., Dover: New York, 2005.
Harris, D. C.; Bertolucci, M. D. *Symmetry and Spectroscopy – An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy*, Dover: New York, 1978.


Docente Responsável

Aprovado pelo Colegiado em / / .

Coordenador do Curso