



Universidade Federal
de São João del-Rei

COORDENADORIA DO CURSO DE QUÍMICA PLANO DE ENSINO

Unidade Curricular: QUÍMICA QUÂNTICA E ESPECTROSCÓPIA

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: 2021

Semestre: 1º

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: Átomo de Hidrogênio; Spin; 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 (58h) e realização de atividades não presenciais pelos discentes (8h). 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 trabalho).

FORMA E CRONOGRAMA DE AVALIAÇÃO

Serão realizadas 4 avaliações on-line no decorrer do semestre, com valor de 2,5 pontos cada uma. Serão considerados aprovados os discentes que obtiverem nota igual ou superior a 6,0 na soma destas 4 avaliações. Uma prova substitutiva on-line, 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 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.
Hollauer, E. *Química Quântica*. LTC: Rio de Janeiro, 2008.
Levine, I. N. *Físico-Química*, 6ª ed., vol. 1-2, LTC: Rio de Janeiro, 2012.
Engel, T. *Quantum Chemistry & Spectroscopy*, 3ª ed., Pearson: New York, 2013.
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 11/05/2021

Coordenador do Curso



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO JOÃO DEL-REI
SISTEMA INTEGRADO DE PATRIMÔNIO,
ADMINISTRAÇÃO E CONTRATOS

FOLHA DE ASSINATURAS

Emitido em 2021

PLANO DE ENSINO Nº 225/2021 - COQUI (12.71)

(Nº do Protocolo: NÃO PROTOCOLADO)

(Assinado digitalmente em 12/05/2021 20:45)

PATRICIA BENEDINI MARTELLI

COORDENADOR DE CURSO - TITULAR

CHEFE DE UNIDADE

COQUI (12.71)

Matrícula: 1348442

(Assinado digitalmente em 12/05/2021 18:53)

STELLA MARIS RESENDE

PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR

DCNAT (12.12)

Matrícula: 1544781

Para verificar a autenticidade deste documento entre em <https://sipac.ufsj.edu.br/documentos/> informando seu número: **225**, ano: **2021**, tipo: **PLANO DE ENSINO**, data de emissão: **12/05/2021** e o código de verificação:

438f6114d8