



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: 2023

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 aulas expositivas, com uso de recursos multimídia quando necessário. Serão realizados exercícios de fixação em sala de aula e haverá aulas exclusivas para exercícios e revisão do conteúdo antes de cada avaliação.

FORMA E CRONOGRAMA DE AVALIAÇÃO

Serão realizadas 4 avaliações escritas no decorrer do semestre, com valor de 2,5 pontos cada uma, e serão considerados aprovados os discentes que obtiverem nota igual ou superior a 6,0 na soma destas 4 avaliações (Nota Final). Os discentes que desejarem poderão realizar uma prova substitutiva ao final do semestre, versando sobre todo o conteúdo da disciplina, cuja nota poderá substituir a menor nota obtida nas quatro avaliações regulares, 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 13/12/2022

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 2023

PLANO DE ENSINO Nº 126/2023 - COQUI (12.71)

(Nº do Protocolo: NÃO PROTOCOLADO)

(Assinado digitalmente em 26/01/2023 12:21)

PATRICIA BENEDINI MARTELLI

COORDENADOR DE CURSO - TITULAR

COQUI (12.71)

Matrícula: 1348442

(Assinado digitalmente em 24/01/2023 17:54)

STELLA MARIS RESENDE

PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR

COQUI (12.71)

Matrícula: 1544781

Para verificar a autenticidade deste documento entre em <https://sipac.ufsj.edu.br/public/documentos/> informando seu número: **126**, ano: **2023**, tipo: **PLANO DE ENSINO**, data de emissão: **24/01/2023** e o código de verificação: **6b779cfd10**