



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 FUNDAMENTOS DE QUÍMICA QUÂNTICA		Co-requisito: -			
C.H. Total: 60 h-66ha	C.H. Prática: -	C. H. Teórica: 60 h-66ha	Grau: Bacharelado	Ano: 2023	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">- Métodos de aproximação: Princípio variacional e teoria de perturbação- Átomos multieletrônicos: campo médio e orbitais, método de Hartree, spin, antissimetria da função de onda, método de Hartree-Fock, Termos atômicos- Moléculas e Ligação química: Aproximação de Born-Oppenheimer, teoria de orbitais moleculares, método de Huckel- interação da radiação com a matéria: equação de Schrodinger dependente do tempo- espectroscopia rotacional: diatômicas e poliatômicas- espectroscopia vibracional: diatômicas, anarmonicidade, poliatômicas e modos normais.- Espectroscopia eletrônica: transições eletrônicas, princípio de Franck-Condon, fotoquímica- 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.					
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, correspondendo a 70% da nota (35% a primeira e 35% a segunda), e trabalhos práticos, 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 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. McQuarrie, D. A. <i>Physical Chemistry, A Molecular Approach</i> , University Science Books, Sausalito, 1998. 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. Trsic, M.; Pinto, M. F. S. <i>Química Quântica: Fundamentos e Aplicações</i> . Barueri: Manole, 2009. Levine, I. N. <i>Físico-Química</i> , 6ª ed., vol. 1-2, LTC: Rio de Janeiro, 2012. Alcacer, L. <i>Introdução à Mecânica Quântica</i> , Editora Livraria da Física: São Paulo, 2012. Steinfeld, J. I. <i>Molecules and Radiation: An Introduction to Modern Molecular Spectroscopy</i> , 2ª ed., Dover: New York, 2005. 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 / / .		

Jonfredo R. P. Jr.

Docente Responsável

Coordenador do Curso