



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS
Coordenadoria do Curso de Graduação em Química
Campus Universitário Reitor João David Ferreira Lima - Trindade
CEP 88040.900 - Florianópolis SC
Fone: (48) 3721-6853/2312
E-mail: quimica@contato.ufsc.br - <http://quimica.ufsc.br/>



PLANO DE ENSINO
SEMESTRE - 2021.2

I. IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:

CÓDIGO	NOME DA DISCIPLINA	TURMAS	Nº DE HORAS-AULA SEMANAIS		TOTAL DE HORAS-AULA SEMESTRAIS
			TEÓRICAS	PRÁTICAS	
QMC5403	Fundamentos de Química Quântica e Espectroscopia	04003 e 04205	04	00	72

II. PROFESSOR(ES) MINISTRANTE(S)

Giliandro Farias

III. PRÉ-REQUISITO(S)

CÓDIGO	NOME DA DISCIPLINA
QMC-5512	Geometria Analítica
MTM-7137	Cálculo II
FSC-5113	Física III

IV CURSO(S) PARA O(S) QUAL(IS) A DISCIPLINA É OFERECIDA

Curso de Graduação em Química: Bacharelado e Licenciatura

V. EMENTA

Radiação do corpo negro, efeito fotoelétrico, equações de Planck, dualidade onda-partícula, átomos de Bohr, espectro do hidrogênio, fórmula de Rydberg princípio da incerteza, equação de Schrödinger, postulados e princípios gerais da mecânica quântica, operadores, equações de autovalor, autofunções, partícula nas caixas 1d e 3D, momento angular, oscilador harmônico, rotor rígido, átomo de hidrogênio, átomos hidrogeniônicos, spin eletrônico e o princípio da exclusão de Pauli. Átomos multieletrônicos, termos espectroscópicos, estrutura eletrônica de moléculas diatômicas, teoria de orbitais moleculares OM, estrutura eletrônica de moléculas poliatômicas, teoria de grupos, espectroscopia molecular, ressonância magnética nuclear, espectroscopia de lasers.

VI. OBJETIVOS

GERAL: Fornecer ao aluno um panorama geral sobre os principais formalismos que constituem a mecânica quântica, bem como as noções gerais da espectroscopia roto-vibracional. Com base nos conhecimentos adquiridos durante o curso, o aluno deverá ser capaz de: Enunciar e comentar os princípios da mecânica quântica; reconhecer os problemas específicos em espectroscopia roto-vibracional; resolver problemas sobre os temas desenvolvidos.

ESPECÍFICOS:

Ao final de cada unidade o aluno será capaz de resolver problemas pertinentes à cada um dos assuntos abordados. Sendo capaz de correlacioná-los e aplicá-los a diversos problemas em química.

VII. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

1.0) A equação de Schrödinger

- 1.1 A fundamentação histórica da mecânica quântica.
- 1.2 Princípio da incerteza de Heisenberg.
- 1.3 A equação de ondas clássica
- 1.4 A equação de Schrödinger independente do tempo.

- 2.0) A partícula na caixa**
 - 2.1 A partícula livre
 - 2.2 A partícula nas caixas uni, bi e tridimensional
- 3.0) Operadores**
 - 3.1 Autofunções e autovalores
 - 3.2 Valores médios
 - 3.3 Funções de onda aceitáveis
- 4.0) Postulados e teoremas da mecânica quântica.**
 - 4.1 operadores hermitianos
 - 4.2 Expansões de autofunções
 - 4.3 Computadores
 - 4.4 Superposição de estados
 - 4.5 Posição de autofunções
- 5.0) O momento angular**
 - 5.1 Medidas simultâneas de várias propriedades
 - 5.2 Momento angular de sistemas de uma partícula
 - 5.3 Método de operadores escada para o momento angular
- 6.0) O oscilador harmônico e o rotor rígido como modelos espectroscópicos**
 - 6.1 Oscilador harmônico unidimensional
 - 6.2 Os níveis de energia do oscilador harmônico
 - 6.3 O modelo do oscilador harmônico e o espectro de infravermelho de moléculas diatômicas
 - 6.4 Funções de onda do oscilador harmônico e os polinômios de Hermite
 - 6.5 Rotor rígido (introdução aos sistemas de coordenadas esféricas e derivação do Laplaciano).
 - 6.6. Os níveis de energia do rotor rígido.
 - 6.7. O rotor rígido como um modelo para rotações em moléculas diatômicas.
- 7.0) O átomo de hidrogênio**
 - 7.1 Problema da força central de uma partícula
 - 7.2 Separação de variáveis – sistema de partículas não-interagentes
 - 7.3 Redução do problema de 2 partículas para 1 partícula
 - 7.4 Funções de onda do estado fundamental
 - 7.5 Orbitais hidrogenóides
- 8.0) O spin eletrônico e o princípio da exclusão de Pauli**
 - 8.1 Spin eletrônico
 - 8.2 O spin e o átomo de hidrogênio
 - 8.3 Princípio da exclusão de Pauli
 - 8.4 O determinante de Slater
- 9.0) A estrutura eletrônica de moléculas diatômicas**
 - 9.1 A aproximação de Born-Oppenheimer
 - 9.2 O movimento nuclear
 - 9.3 A molécula íon de hidrogênio – H_2^+
 - 9.4 A teoria dos orbitais moleculares – OM
- 10.0) A estrutura eletrônica de moléculas poliatômicas**
 - 10.1 Os orbitais híbridos
 - 10.2 Elétrons de ligações e pares isolados
 - 10.3 Espectroscopia de fotoelétrons e os orbitais moleculares
- 11.0) Espectroscopia Molecular**
 - 11.1 Processos moleculares e o espectro eletromagnético
 - 11.2 transições rotacionais e vibracionais
 - 11.3 Espaçamento de linhas no espectro roto-vibracional – ramos P e R
 - 11.4 Princípio de Frank-Condon
 - 11.5 Vibrações em moléculas poliatômicas
 - 11.6 Regras de Seleção.

VIII. METODOLOGIA DE ENSINO REMOTO / DESENVOLVIMENTO DO PROGRAMA

A disciplina será ministrada através de aulas expositivas SÍNCRONAS NO GOOGLE MEET e MOODLE, bem como ATIVIDADES ASSÍNCRONAS ADICIONAIS para resolução de dúvidas de exercícios. Além disso, o aluno deverá complementar seus estudos por meio BIBLIOGRAFIA SUGERIDA E FORNECIDA. Serão indicados questões teóricas, exercícios numéricos e problemas que visem a aplicação dos conceitos e postulados apresentados nas aulas expositivas, todos esses na forma de LISTA DE EXERCÍCIOS. A busca e interpretação de artigos científicos atuais que abordem tópicos do conteúdo programático será incentivada. Ambiente MOODLE: Várias atividades serão realizadas neste ambiente (moodle.ufsc.br). Todos os alunos regularmente matriculados estão automaticamente inscritos no ambiente.

IX. METODOLOGIA DE AVALIAÇÃO

A avaliação do desempenho na disciplina se dará através de três avaliações, sendo estas três provas síncronas (Pi). A média final (MF) será a média das provas
Alunos com Média Final maior ou igual a 6,0 (seis) estão aprovados. Aluno com Média Final menor que 6,0 (seis) e maior ou igual a 3,0 (três) vão para exame de recuperação, e Aluno com Média Final menor que 3,0 (três)

X. NOVA AVALIAÇÃO

Recuperação: prova teórica no final do semestre versando sobre todo o conteúdo programático. A nota necessária para aprovação será a necessária para integralizar média 6,0 (seis) com a média final obtida nas provas regulares. Por exemplo, se o aluno obteve média final 5,5, terá que ter nota 6,5 na prova de recuperação, para ficar com média final 6,0 e ser aprovado. O aluno só terá direito à Recuperação se tiver frequência suficiente (> 75%, FS). Nota do exame de recuperação somada a média do semestre divididas por 2 (dois) = Média Final.

XI. CRONOGRAMA

1. CRONOGRAMA TEÓRICO:

Data	Conteúdo	H/A
26/10	Introdução a Quântica	2
04/11	Introdução a Quântica	2
09/11	A equação de Schrödinger independente do tempo	2
11/11	A equação de Schrödinger independente do tempo	2
16/11	A partícula na caixa	2
18/11	A partícula na caixa	2
23/11	A partícula na caixa-3D	2
25/11	Postulados e teoremas da mecânica quântica	2
30/11	Prova 1	2
02/12	O oscilador harmônico e o rotor rígido como modelos espectroscópicos	2
07/12	O oscilador harmônico e o rotor rígido como modelos espectroscópicos	2
09/12	O oscilador harmônico e o rotor rígido como modelos espectroscópicos	2
14/12	O átomo de hidrogênio	2
16/12	O átomo de hidrogênio	2
01/02	O átomo de hidrogênio	2
03/02	Átomos Multieletrônicos	2
08/02	Átomos Multieletrônicos	2
10/02	Prova 2	2
15/02	A estrutura eletrônica de moléculas diatômicas	2
17/02	A estrutura eletrônica de moléculas diatômicas	2
22/02	A estrutura eletrônica de moléculas poliatômicas	2
24/02	A estrutura eletrônica de moléculas poliatômicas	2
03/03	Simetria e Espectroscopia Molecular	2
08/03	Simetria e Espectroscopia Molecular	2
10/03	Introdução às espectroscopias de ressonância magnética nuclear e Lasers	2
15/03	Introdução às espectroscopias de ressonância magnética nuclear e Lasers	2
17/03	Prova 3	2
22/03	Monitoria Revisão/dúvidas	2
24/03	Prova de Recuperação	2
26/03	Fim do semestre letivo	2

XII. BIBLIOGRAFIA BÁSICA (deve conter no mínimo 3 títulos, sendo 1 exemplar de cada título para cada 5 alunos disponível no sistema de Bibliotecas da UFSC)

1.0 McQUARRIE, D. A.; Simon, *Physical Chemistry: A Molecular Approach*, 1st. Ed. University Science Books,

California, 1997.

2.0 McQUARRIE, D. A.; *Quantum Chemistry*, 1st. Ed. University Science Books, California, 1983.

3.0 ENGEL, T.; *Quantum Chemistry and Spectroscopy*, 3rd. edition Pearson, NY, 2010.

XIII. BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR (deve conter no mínimo 5 títulos, com pelo menos 2 exemplares de cada título disponíveis no sistema de Bibliotecas da UFSC ou com acesso virtual)

1.0 LEVINE, I.; *Quantum Chemistry*, 6th Ed. Prentice Hall, NY, 2008.

2.0 PAULING, L.; Wilson, B. Jr.; *Introduction to Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, NY, 1935.

3.0 ATKINS, P.W. *Molecular quantum mechanics*, 2.ed. Oxford: Oxford University Press, c1983.

4.0 PILAR, F. L.; *Elementary Quantum Chemistry*, 2nd Ed. McGraw-Hill, NY, 1970.

5.0 TIPLER, Paul Allen; LLEWELLYN, Ralph A. *Física moderna*, 3.ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006.

Assinatura do Professor

Assinatura do Chefe do
Departamento

Aprovado no Colegiado do Curso de Química

Em: ____/____/____