**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 – 2022.1

**I. IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:**

| CÓDIGO | NOME DA DISCIPLINA | TURMA | Nº DE HORAS-AULA SEMANAIS | | TOTAL DE HORAS-AULA SEMESTRAIS |
|---|---|---|---|---|---|
| | | | TEÓRICAS | PRÁTICAS* | |
| QMC 5403 | Fundamentos de Química Quântica e Espectroscopia | 04003 e 04205 | 4 | 0 | 72 |

**II. PROFESSOR(ES) MINISTRANTE(S)**

Thiago Ferreira da Conceição (Thiago.conceicao@ufsc.br)

**III. PRÉ-REQUISITO(S)**

| CÓDIGO | NOME DA DISCIPLINA |
|---|---|
| MTM 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, formula 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 a cada um dos assuntos abordados, sendo capaz de correlacioná-los e aplicá-los a diversos problemas em química.

**VII. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO**

**1.0) O nascimento da mecânica quântica.**
1.1 Radiação do corpo negro e a equação de Planck.
1.2 Equações de Einstein e Debye para a capacidade calorífica.
1.3 Efeito fotoelétrico.
1.4 De Broglie e a dualidade onda-partícula.

**2.0) A equação de Schrödinger.**
2.1 Interpretação de Born.
2.2 Normalização e quantização.
2.3 Cálculos de probabilidade.

**3.0) Operadores.**
3.1 Autofunções e autovalores.

3.2 Valores médios.
3.3 Operadores hermitianos.
3.4 Ortogonalidade.

**4.0) Postulados e teoremas da mecânica quântica.**
4.1 Superposição de estados.
4.2 Princípio da incerteza de Heisenberg.
4.3 Observáveis complementares e comutadores.

**5.0) O movimento de translação.**
5.1 Partícula em movimento livre.
5.2 Partícula em caixas com uma, duas e três dimensões.
5.3 Degenerescência e tunelamento.

**6.0) O oscilador harmônico e o rotor rígido como modelos espectroscópicos**
6.1 Oscilador harmônico.
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 Movimento de rotação (partícula em um anel e rotor rígido).
6.6.Os níveis de energia de rotação.
6.7.O rotor rígido como um modelo para rotações em moléculas diatômicas.

**7.0) O átomo de hidrogênio**
7.1 Separação de variáveis.
7.3 Soluções radiais.
7.4 Orbitais s, p e d.

**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 (construção)
10.2 Elétrons de ligações e pares isolados
10.3 Espectroscopia de fotoelétrons e os orbitais moleculares

**11.0) Espectroscopia Molecular**
11.1 Simetria Molecular
11.2 transições rotacionais e vibracionais
11.3 Espacamento de linhas no espectro roto-vibracional – ramos P e R
11.4 Principio Frank Condon
11.5 Vibrações em moléculas poliatômicas
11.6 Regras de Seleção.

**VIII. METODOLOGIA DE ENSINO / DESENVOLVIMENTO DO PROGRAMA**

O conteúdo será trabalhado em aulas presenciais utilizando o quadro negro e recursos multimídia. Também serão realizadas atividades em sala em que os alunos serão requisitados a responder questões com o auxílio de livros, do material fornecido pelo professor, da internet etc. Eventualmente serão realizadas atividades como a elaboração vídeos e infográficos que

poderão valer ponto na média final e poderão ser divulgados na internet caso haja interesse e consentimento de todos os alunos.

**IX. METODOLOGIA DE AVALIAÇÃO**

Serão realizadas três avaliações remotas utilizando uma plataforma adequada (Moodle, por exemplo) cuja média ponderada comporá 95% da média final. Os restantes 5% virão de atividades realizadas em sala, presença e participação.

**X. NOVA AVALIAÇÃO**

**RECUPERAÇÃO** - Se o aluno com FS obtiver média das avaliações regulares no intervalo 3,0 < Nota < 6,0 (Artigo 70 §2º) ele tem direito de fazer uma prova de recuperação. Neste caso, a nota final será a média aritmética entre o somatório da nota da prova de recuperação e a média das avaliações regulares (Artigo 71 §3º ). A prova de recuperação irá abordar todo o conteúdo da disciplina (unidades 1 a 5).

**SUBSTITUTIVA** - O aluno que faltar alguma avaliação por motivo de saúde terá o direito de fazer uma prova mediante pedido de avaliação à Chefia do Departamento de Química com apresentação do atestado médico dentro do prazo de 3 (três) dias úteis após a realização da mesma (Art. 74 da Resolução no 017/CUn/97 – UFSC). Essa avaliação será realizada no final no semestre, antes da data da prova de recuperação, com o conteúdo correspondente ao da prova a ser reposta.

**XI. CRONOGRAMA**

| Data | Conteúdo | H/A |
|---|---|---|
| 12/04 | Semana de integração | 2 |
| 14/04 | Semana de integração | 2 |
| 19/04 | Apresentação da disciplina: Introdução a teoria quântica | 2 |
| 21/04 | **Feriado: Tiradentes** | 2 |
| 26/04 | Antiga teoria quântica e a equação de Schrödinger | 2 |
| 28/04 | Operadores e autofunções | 2 |
| 03/05 | Partícula em uma caixa unidimensional | 2 |
| 05/05 | Partícula na caixa bi e tridimensional | 2 |
| 10/05 | Revisão e exercícios | 2 |
| **12/05** | **Primeira avaliação** | 2 |
| 17/05 | Oscilador Harmônico: introdução e conceitos gerais | 2 |
| 19/05 | Oscilador Harmônico: funções de onda e propriedades | 2 |
| 24/05 | Oscilador harmônico: espectroscopia no infravermelho, exercícios | 2 |
| 26/05 | Partícula girando em um anel/rotor rígido | 2 |
| 31/05 | Partícula girando em uma esfera, espectroscopia rotacional | 2 |
| 02/06 | Átomos hidrogenoides | 2 |
| 07/06 | Átomos hidrogenoides | 2 |
| 09/06 | Revisão e exercícios | 2 |
| **14/06** | **Segunda avaliação** | 2 |
| 16/06 | **Feriado: Corpus Christi** | 2 |
| 21/06 | Átomos polieletrônicos: spin; penetração e blindagem. | 2 |
| 23/06 | Princípio de Pauli; princípio da estruturação;Determinante de Slater; tabela periódica. | 2 |
| 28/06 | Espectroscopia eletrônica: símbolos dos termos | 2 |
| 30/06 | Espectroscopia eletrônica: regras de seleção | 2 |
| 05/07 | Teoria da ligação de valência | 2 |
| 07/07 | Teoria do Orbital Molecular: conceitos gerais | 2 |
| 12/07 | Teoria do Orbital Molecular: moléculas diatômicas homonucleares | 2 |
| 14/07 | Teoria do Orbital Molecular: moléculas diatômicas heteronucleares | 2 |
| 19/07 | Noções de teoria de grupo | 2 |
| 21/07 | Revisão e exercícios | 2 |
| **26/07** | **Terceira avaliação** | 2 |
| **28/07** | **Prova de segunda chamada** | 2 |
| **02/08** | **Prova de recuperação** | 2 |

**XII. BIBLIOGRAFIA BÁSICA**


1. Atkins P. W., de Paula, J. *Físico-Química*, 7ª Ed., Volume 2, LTC, Rio de Janeiro, 2003.
2. Atkins P. W., de Paula J., Friedman R. *Quanta, Matéria e Mudança*, Volume 1, LTC, Rio de Janeiro, 2011.
3. Mcquarrie D. A. S. *Physical Chemistry: A Molecular Approach*, 1st. Ed. University Science Books, California, 1997.


**XIII. BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR**


1. Levine I.N. *Físico-Química*, Volume 2, 6ª Ed. LTC, Rio de Janeiro, 2011.
2. Eisberg R., Resnick R. *Física Quântica*, Campus Ltda, Rio de Janeiro, 1979.
3. Tipler Paul Allen; LLEWELLYN, Ralph A. *Física moderna*, 3.ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006.

4. Pauling, L.; Wilson, B. Jr.; *Introduction to Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, NY, 1935.
5. Pilar, F. L.; *Elementary Quantum Chemistry*, 2nd Ed. McGraw-Hill, NY, 1970.

Documento assinado digitalmente
Thiago Ferreira da Conceicao
Data: 07/04/2022 09:27:49-0300
CPF: 059.178.719-90
Verifique as assinaturas em https://v.ufsc.br

Assinatura do Professor

Documento assinado digitalmente
Valdir Rosa Correia
Data: 13/04/2022 14:10:52-0300
CPF: 216.244.539-53
Verifique as assinaturas em https://v.ufsc.br

Assinatura do Chefe do Departamento

Aprovado no Colegiado do Curso de Química
Em: _____/_____/_____