



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Campus Universitário Reitor João David Ferreira Lima - Trindade

CEP 88040-900-Florianópolis SC

Fone: (48) 3721-6852

e-mail: gmc@contato.ufsc.br

<https://qmc.ufsc.br>



PLANO DE ENSINO – 2022.2

I. IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA				
CÓDIGO	NOME DA DISCIPLINA	Nº de Horas-Aula Semanais		Total de Horas-Aula Semestrais
		Teóricas	Práticas	
QMC 5423	Fundamentos de Química Quântica	04	0	72

II. HORÁRIO	
AULA TEÓRICA	AULA PRÁTICA
2.1510-2 / 5.1330-2	

III. PRÉ-REQUISITO (S)	
CÓDIGO	NOME DA DISCIPLINA
MTM 5511	Geometria Analítica
MTM 3102	Cálculo II

IV. PROFESSOR MINISTRANTE
Professor Dr. Luis Henrique da Silveira Lacerda luis.lacerda@ufsc.br CFM, Departamento de Química, Sala 312.

V CURSO PARA O QUAL A DISCIPLINA É OFERECIDA
Bacharelado em Química

VI. 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 símbolo, estrutura eletrônica de moléculas diatômicas, teoria de orbitais moleculares OM, estrutura eletrônica de moléculas poliatômicas, teoria da ligação de valência.

VII. OBJETIVOS
Objetivos Gerais - Conhecer e aplicar os principais conceitos de química quântica; - Relacionar os conceitos apresentados a diferentes técnicas espectroscópicas.

VIII. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO
1. Antiga teoria Quântica 1.1. O espectro do corpo negro 1.2. O efeito Fotoelétrico 1.3. Capacidade Térmica dos sólidos 1.4. Estrutura Nuclear 1.5. Espectroscopia Atômica 1.6. Dualidade-onda partícula 1.7. Química Quântica Moderna

- 2. Equação de Schrödinger**
 - 2.1. A fundamentação histórica da mecânica quântica.
 - 2.2. Princípio da incerteza de Heisenberg.
 - 2.3. A equação de ondas clássica
 - 2.4. A equação de Schrödinger independente do tempo.
 - 2.5. A partícula na caixa: A partícula livre, partícula na caixa unidimensional e tridimensional
- 3. Postulados e teoremas da mecânica Quântica**
 - 3.1. Autofunções e autovalores
 - 3.2. Valores médios
 - 3.3. Funções de onda aceitáveis
 - 3.4. Operadores hermitianos
 - 3.5. Expansões de autofunções
 - 3.6. Comutadores
 - 3.7. Superposição de estados
 - 3.8. Posição de autofunções
- 4. O momento angular**
 - 4.1. Medidas simultâneas de várias propriedades
 - 4.2. Momento angular de sistemas de uma partícula
 - 4.3. Métodos de operadores escada para o momento angular
- 5. O oscilador harmônico e o rotor rígido como modelos espectroscópicos**
 - 5.1. Oscilador harmônico unidimensional
 - 5.2. Os níveis de energia do oscilador harmônico
 - 5.3. O modelo do oscilador harmônico e o espectro de infravermelho de moléculas diatômicas
 - 5.4. Funções de onda do oscilador harmônico e os polinômios de Hermite
 - 5.5. Rotor rígido (introdução ao sistemas de coordenadas esféricas e derivação do Laplaciano).
 - 5.6. Os níveis de energia do rotor rígido.
 - 5.7. O rotor rígido como um modelo para rotações em moléculas diatômicas
- 6. O átomo de Hidrogênio**
 - 6.1. Problema da força central de uma partícula
 - 6.2. Separação de variáveis – sistema de partículas não-interagentes
 - 6.3. Redução do problema de 2 partículas para 1 partícula
 - 6.4. Funções de onda do estado fundamental
 - 6.5. Orbitais hidrogenóides
- 7. O spin eletrônico e o princípio de exclusão de Pauli**
 - 7.1. Spin eletrônico
 - 7.2. O spin e o átomo de hidrogênio
 - 7.3. Princípio da exclusão de Pauli
 - 7.4. O determinante de Slater
- 8. A estrutura eletrônica de moléculas diatômicas**
 - 8.1. A aproximação de Born-Oppenheimer
 - 8.2. O movimento nuclear
 - 8.3. A molécula íon de hidrogênio – H_2^+
 - 8.4. A teoria dos orbitais moleculares – OM
 - 8.5. A Teoria de ligação de valência
- 9. A estrutura eletrônica de moléculas poliatômicas**
 - 9.1. Os orbitais híbridos
 - 9.2. Elétrons de ligações e pares isolados
 - 9.3. Espectroscopia de fotoelétrons e os orbitais moleculares
 - 9.4. Métodos de Debye-Hueckel

IX. METODOLOGIA DE ENSINO / DESENVOLVIMENTO DO PROGRAMA

Para a integralização dos créditos teóricos será feito uso de aulas expositivas e de recursos como quadro negro/giz e multimídia. Alguns exercícios e problemas serão trabalhados em sala de aula, sempre no contexto do tópico trabalhado. Serão disponibilizadas listas de exercícios para direcionar os estudos para aprendizado e para as avaliações.

OBS: Os materiais da disciplina, disponibilizados e registradas na Plataforma do Ambiente Virtual de Aprendizagem Moodle, são para uso exclusivo dos estudantes regularmente matriculados na disciplina QMC5423 no semestre 2022.2

X. METODOLOGIA DE AVALIAÇÃO

AVALIAÇÃO TEÓRICA

- Serão realizadas 3 provas escritas, de pesos iguais (10,0), realizadas em horário da aula, versando sobre os conteúdos das unidades 1 a 3 (prova 1), unidades 4 a 6 (prova 2) e das unidades 7 e 9 (prova 3), em datas definidas a seguir. Após a divulgação das notas de cada avaliação, a revisão das provas deve ser realizada com o professor na sala 312 do departamento de Química. Não serão realizadas revisões de prova em sala.

CONSIDERAÇÕES IMPORTANTES:

De acordo com a Resolução 17/CUn/97 – Capítulo IV – Seção I – Artigo 72 – A nota mínima de aprovação em cada disciplina é 6,0 (seis vírgula zero).

De acordo com a Resolução 17/CUn/97 – Capítulo IV – Seção I – Artigo 70 – § 40 – Ao aluno que não comparecer às avaliações ou não apresentar trabalhos no prazo estabelecido será atribuída nota 0 (zero).

De acordo com a Resolução 17/CUn/97 – Capítulo IV – Seção I – Artigo 74. O aluno, que por motivo de força maior e plenamente justificado, deixar de realizar avaliações previstas no plano de ensino, deverá formalizar pedido de avaliação à Chefia do Departamento de Ensino ao qual a disciplina pertence, dentro do prazo de 2 (dois) dias úteis.

REVISÃO DA AVALIAÇÃO

Segundo a Resolução 017/CUn/97 em seu Art. 73, é facultado ao aluno requerer ao Chefe do Departamento a revisão da avaliação, mediante justificativa circunstanciada dentro de 02 (dois) dias úteis, após a divulgação do resultado.

XI. NOVA AVALIAÇÃO (RECUPERAÇÃO)

Conforme estabelece o §2º do Art.70, da Resolução nº 017/CUn/97, o aluno com frequência suficiente (FS) e média das notas de avaliações do semestre entre **3,0 (três vírgula zero) e 5,5 (cinco vírgula cinco)** terá direito a uma nova avaliação teórica (cumulativa) no final do semestre. A nota final será calculada através da média aritmética entre a média das notas das avaliações parciais e a nota obtida na nova avaliação. O aluno deverá alcançar a nota mínima 6,0 (seis) para ser aprovado.

Observação: O aluno que faltar alguma avaliação por motivo de saúde terá o direito de fazer a 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). Caso a solicitação seja deferida pela Chefia, essa avaliação será realizada no final no semestre, com o conteúdo correspondente a prova que estará sendo repostada.

XII. BIBLIOGRAFIA BÁSICA

1. ATKINS, P.W.; de Paula, J.; **Físico-Química**, 9ª Ed., Volumes 1 e 2, Editora LTC, 2012.
2. ATKINS, P.W.; de Paula, J.; FRIEDMAN, R., **Quanta, matéria e mudança: uma abordagem molecular para a físico-química**, Rio de Janeiro: LTC, 2011.
3. HOLLAUER, E. **Química quântica**. Rio de Janeiro: LTC, 2008. 475 p.
4. DIAS, J.J.C.T. **Química Quântica: fundamentos e métodos**. Lisboa: Fundação C. Gulbenkian, 1982. 448p.

XIII. BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

1. LEVINE, I.; **Quantum Chemistry**, 6th Ed. Prentice Hall, NY, 2008.
2. PAULING, L.; Wilson, B. Jr.; **Introduction to Quantum Mechanics**, McGraw-Hill, NY, 1935.
3. ATKINS, P.W. **Molecular quantum mechanics**, 2.ed. Oxford: Oxford University Press, c1983.
4. PILAR, F. L.; **Elementary Quantum Chemistry**, 2nd Ed. McGraw-Hill, NY, 1970.
5. McQUARRIE, D. A.; SIMON; **Physical Chemistry**, 1st. Ed., University Science Books, 1997.

Prof. Dr. Luis Henrique da Silveira Lacerda

Chefe do Depto. De Química

Aprovado no Colegiado do Departamento de
Química/CFM em ____/____/____