



**DADOS DE IDENTIFICAÇÃO E ATRIBUTOS<sup>1</sup>**

CARGA HORÁRIA (estudante)							MODALIDADE/ SUBMODALIDADE	PRÉ-REQUISITO (POR CURSO)
T	T/P	P	PP	Ext	E	TOTAL	Disciplina/Teórica	-
60						60		

  

CARGA HORÁRIA (docente/turma)							MÓDULO						SEMESTRE DE INÍCIO DA VIGÊNCIA
T	T/P	P	PP	Ext	E	TOTAL	T	T/ P	P	PP	Ext t	E	2024.2
60						60	30						

**EMENTA**

Fundamentos da estrutura eletrônica de átomos e moléculas; aproximações para a descrição da ligação química; a simetria molecular.

**OBJETIVOS**

**OBJETIVO GERAL**

Apresentação e aplicação dos fundamentos da mecânica quântica utilizados na interpretação de fenômenos físico-químicos em nível molecular.

**OBJETIVOS ESPECÍFICOS**

1. Compreender os conceitos fundamentais da teoria quântica.
2. Ser capaz de aplicar tais conceitos a modelos simples.
3. Interpretar o comportamento de átomos e moléculas simples através da teoria quântica.
4. Correlacionar este novo ponto de vista para problemas químicos mais complexos.

**CONTEÚDO PROGRAMÁTICO**

1. As origens da teoria quântica.
  - (a) A radiação do corpo negro e a hipótese de Planck.
  - (b) Propriedades corpusculares da radiação: Efeito fotoelétrico.
  - (c) Propriedades ondulatórias das partículas e o postulado de de Broglie.
  - (d) O modelo atômico de Bohr.
  - (e) O princípio da incerteza de Heisenberg.
2. A equação de Schrödinger.
  - (a) A equação de Schrödinger dependente e independente do tempo.
  - (b) A interpretação probabilística de Max Born.
  - (c) Propriedades de autofunções e autovalores.
3. As soluções da equação de Schrödinger independente do tempo:
  - (a) A partícula livre e a partícula na caixa.
  - (b) O modelo do oscilador harmônico e a espectroscopia vibracional.
  - (c) O modelo do rotor rígido e a espectroscopia rotacional.
4. O átomo de hidrogênio.
  - (a) Spin eletrônico.
  - (b) Interação (Efeito) spin-órbita.
  - (c) Termos espectroscópicos para o átomo de hidrogênio.

<sup>1</sup> Os "dados de identificação e atributos" devem estar registrados conforme especificado no Programa do Componente Curricular e disponível no site da Superintendência Acadêmica (SUPAC)SIAC. O único campo a ser preenchido nesse tópico do formulário é o que diz respeito ao módulo de vagas ofertadas.

---

(d) A equação de Schrödinger para o átomo de hélio.

5. Introdução aos métodos aproximados para resolução da equação de Schrödinger.

(a) Método variacional.

(b) Teoria de perturbação.

6. O átomo de hélio e o princípio da antissimetria.

7. Determinantes de Slater e introdução a sistemas com mais de dois elétrons.

8. A ligação química: moléculas de 1 e 2 elétrons.

9. Métodos de estrutura eletrônica aplicado a átomos e moléculas.

---

### **METODOLOGIA DE ENSINO-APRENDIZAGEM**

O conteúdo do componente curricular será desenvolvido durante o semestre através de aulas expositivas, utilizando recursos audiovisuais (slides, vídeos, e softwares de visualização molecular) e com discussões de textos da área com participação ativa dos estudantes.

---

### **AVALIAÇÃO DA APRENDIZAGEM**

A nota final será atribuída através da média aritmética das listas de exercícios.

---

### **REFERÊNCIAS**

#### **BIBLIOGRAFIA BÁSICA**

1. McQuarrie, D. A.; Quantum Chemistry, 2nd Edition, Univesity Science Books, (2008).
2. Levine, I. N.; Quantum Chemistry, 7th Edition, Pearson Education, (2013).
3. Pilar, F. L.; Elementary Quantum Chemistry, 2nd Edition, Dover Publications, (2014).
4. Atkins, P. W. and Friedman, R. S.; Molecular Quantum Mechanics, 4th Edition, Oxford, (2005).

#### **BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR**

5. Atkins, P. W.; Físico-Química, Volume 1, Nona Edição, LTC, (2012).
  6. Ball, D. W.; Físico-Química, Volume 2, Primeira Edição, Cengage CTP, (2005).
  7. Levine, I. N.; Físico-Química, Volume 2, Sexta Edição, LTC, (2012).
- 
- 

**Aprovado em reunião de Departamento (ou equivalente)<sup>2</sup>:** \_\_\_\_\_ em \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_  
Assinatura do Chefe do Departamento/ Coordenador Acadêmico

---

<sup>2</sup> O plano de ensino-aprendizagem é um documento que tramita internamente na Unidade acadêmica (especificamente no departamento ou coordenação acadêmica), não sendo necessário encaminhá-lo à Prograd nem à Supac, após aprovação pela instância responsável.