



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA



FICHA DE COMPONENTE CURRICULAR

CÓDIGO:	COMPONENTE CURRICULAR: PRINCÍPIOS DE QUÍMICA QUÂNTICA	
UNIDADE ACADÊMICA OFERTANTE: INSTITUTO DE QUÍMICA		SIGLA: IQUFU
CH TOTAL TEÓRICA: 60 HORAS	CH TOTAL PRÁTICA: 00 HORAS	CH TOTAL: 60 HORAS

1. OBJETIVOS

Familiarizar o aluno com os métodos da Química Quântica, e sua aplicação na previsão de propriedades, e no tratamento de problemas químicos; Saber utilizar didaticamente a Teoria Quântica como novo modelo atômico; Aplicar ferramentas computacionais para ilustrar fenômenos moleculares na escala subatômica.

2. EMENTA

Interação da radiação com a matéria: radiação do corpo negro, efeito fotoelétrico. Origem da mecânica quântica: dualidade onda-partícula e princípio da incerteza. Equação de Schroedinger: dependente e independente do tempo. A equação de Schroedinger como uma equação de autovalores. Operadores. Valores médios. Modelos da partícula livre e partícula na caixa (uma, duas e três dimensões): aplicações. Transições eletrônicas. Modelo do Oscilador Harmônico. Noções sobre oscilador anarmônico: vibrações em moléculas. Transições Vibracionais. Modelo do Rotor Rígido. Transições Rotacionais. Átomos Hidrogenóides. Átomos multieletrônicos: Operador Hamiltoniano. Princípio da exclusão de Pauli, Indistinguibilidade, Spin eletrônico, Princípio da Estruturação, Blindagem. Representação de Funções de Onda. Moléculas. O Método Variacional. Funções Variacionais Lineares. Métodos Aproximados. O método de Hückel simples. Métodos semi-empíricos e ab initio: diferenças, principais qualidades e limitações. Noções da Teoria do Funcional de Densidade. Aplicações da Mecânica Quântica: Otimização de estruturas, Previsão de propriedades termodinâmicas e eletrônicas; Previsão de espectros vibracional, eletrônico e de ressonância magnética nuclear.

3. PROGRAMA

1. A origem da Mecânica Quântica: Interação da radiação com a matéria, dualidade onda-partícula e princípio da incerteza.
2. Desenvolvimento da Equação de Schroedinger: As equações de Schroedinger Dependente e Independente do Tempo.
3. Equação de Schroedinger como uma equação de autovalores; Operadores; Valores Médios
4. Modelos: partícula livre e partícula na caixa (uma e três dimensões). Degenerescência. Aplicações a sistemas atômicos e moléculas. Energias de Transição. Modelo elétron livre.
5. Osciladores Harmônico e Anarmônico: vibrações em moléculas.
6. Rotor rígido. Transições rotacionais.
7. Átomos Hidrogenóides: Aplicação da equação de Schroedinger ao átomo de hidrogênio; Estrutura eletrônica: números quânticos, orbitais, degenerescência; Efeito Zeeman.
8. Átomos multieletrônicos: Dificuldades inerentes à aplicação da Equação de Schroedinger a sistemas multieletrônicos; Spin eletrônico – indistinguibilidade e antisimetria: determinantes de Slater; Princípio de Pauli; Princípio da Estruturação; Blindagem.
9. Moléculas: Dificuldades inerentes à aplicação da Equação de Schroedinger a sistemas moleculares. Princípio de Born-Oppenheimer. Métodos aproximados: O método Variacional. Funções Variacionais Lineares. O Determinante Secular. Método de Hückel simples. Método C.L.O.A. de Roothaan.
10. Métodos Semi-Empíricos, *Ab Initio* e da Teoria do Funcional de Densidade: Otimização de Estruturas; Previsão de propriedades moleculares; estrutura eletrônica; termodinâmicas e eletrônicas; Obtenção de parâmetros espectroscópicos.

4. BIBLIOGRAFIA BÁSICA

ATKINS, P.W., **Físico – Química**. 8. ed., Rio de Janeiro: LTC, v.1. v.2, 2008.

BALL, D.W., **Físico-química**. 1. ed. São Paulo: Thomson, 2005.

CHANG, R., **Físico-Química para as ciências químicas e biológicas**. 3. ed. São Paulo: McGraw-Hill, v.2, 2009.

EISBERG, R.; RESNICK, R., **Física quântica**: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas. 9. ed. Rio de Janeiro: Campus, 1994.

HOLLAUER, E., **Química quântica**. 1. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2008.

MOORE, W. J., **Físico-química**. 1. ed. São Paulo: Blucher, 1986.

5. BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

CASTELLAN, G. W., **Físico – Química**. 1ª ed. Rio de Janeiro: LTC, 1976.

JENSEN, F., **Introduction to Computational Chemistry**, 2. ed. New York: John Wiley & Sons, 2007.

LEVINE, I. N., **Físico - química**, 6. ed., Rio de Janeiro: LTC, 2012.

MERZBACHER, E., **Quantum Mechanics**. 3. ed. New York: John Wiley & Sons, 1998.

MORGON, N.H. E COUTINHO, K., **Métodos de química teórica e modelagem molecular**. 1. ed. São Paulo: Livraria da Física, 2007.

6. APROVAÇÃO

Fábio Augusto do Amaral
Coordenador do Curso de Licenciatura em Química

Nivia Maria Melo Coelho
Diretora do Instituto de Química



Documento assinado eletronicamente por **Fábio Augusto do Amaral, Coordenador(a)**, em 25/04/2019, às 11:11, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Nivia Maria Melo Coelho, Diretor(a)**, em 29/05/2019, às 10:51, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **1128816** e o código CRC **9BBFF04**.