



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA



FICHA DE COMPONENTE CURRICULAR

CÓDIGO:	COMPONENTE CURRICULAR: Química Quântica	
UNIDADE ACADÊMICA OFERTANTE: Instituto de Ciências Exatas e Naturais do Pontal		SIGLA: ICENP
CH TOTAL TEÓRICA: 60	CH TOTAL PRÁTICA: 0	CH TOTAL: 60

1. **OBJETIVOS**

A disciplina tem como finalidade desenvolver os conceitos fundamentais da Química Quântica, mostrando que através destes conceitos é possível prever o comportamento de átomos e moléculas. No decorrer do curso o aluno deverá ser capaz de compreender como resultados experimentais motivaram o desenvolvimento da teoria quântica e que esta teoria fornece as bases para a compreensão do comportamento dos elétrons em átomos e moléculas; compreender que o estado de um sistema é completamente descrito pela função de onda, aplicar a teoria quântica em sistemas como o átomo de hidrogênio, rotor rígido, oscilador harmônico, que permitem compreender as propriedades elétricas e magnéticas da matéria e as ligações químicas.

2. **EMENTA**

Origens da teoria quântica. Princípios da teoria quântica. Soluções analíticas exatas da equação de Schrödinger. Estrutura e espectros atômicos. Estrutura molecular.

3. **PROGRAMA**

1. **Origens da teoria quântica:** Desenvolvimento da teoria quântica a partir da descrição e interpretação de experimentos clássicos como a Radiação do corpo negro, o efeito foto-elétrico, difração de elétrons, e espectros de emissão atômica. Dualidade onda – partícula e a relação de De Broglie. A evolução dos modelos atômico e o átomo de Bohr, quantização de energia.

2. **Princípios da mecânica quântica:** A teoria quântica e seus postulados, a função de onda e a interpretação de Born, a equação de Schrödinger. Normalização. Operadores, autovalores e auto funções. O princípio da incerteza de Heisenberg.

3. **Soluções analíticas exatas da equação de Schrödinger:** Partícula livre e partícula na caixa, Tunelamento Degenerescência. Oscilador Harmônico. Rotor rígido. Vibrações e rotações em moléculas. Átomo de hidrogênio. Momento angular. Spin eletrônico. Princípio da Exclusão de Pauli.

4. **Estrutura e espectros atômicos:** Estrutura eletrônica de átomos hidrogenóides. Orbitais atômicos: forma, energias e interpretação física. Energias de ionização e espectros. Espectros de átomos polieletrônicos. Estados eletrônicos singlete e triplete. Acoplamento spin-órbita. Momento angular total e as regras de Russel-Saunders. Efeito de campos magnéticos e efeito Zeeman.

Estrutura molecular: Teoria da ligação de valência. Teoria dos orbitais moleculares: combinação linear dos orbitais atômicos, Moléculas diatômicas homonucleares e heteronucleares, moléculas poliatômicas, campo autoconsistente, Teoria da perturbação.

4. BIBLIOGRAFIA BÁSICA

- [1] ATKINS, P. W.; PAULA, J. **Físico química**. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2008. v. 2.
[2] LEVINE, I. N. **Quantum chemistry**. Boston: Pearson, 2008.
[3] ATKINS, P. W. **Físico química: fundamentos**. 3. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2003.

5. BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

- [1] McQUARRIE, D. A. **Physical chemistry: a molecular approach**. Sausalito: University Science Books, 1997.
[2] MOORE, W. J. **Físico química**. 4. ed. São Paulo: Edgard Blücher, 2013. 2 v.
[3] LEVINE, I. N. **Físico-química**. 6. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2012, v. 2.
[4] BALL, D. W. **Físico-química**. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2006. v. 2.
[5] ATKINS, P. W.; JONES, L. **Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente**. 3. ed. Porto Alegre: Bookman, 2012.

6. APROVAÇÃO

Hugo de Souza Rodrigues

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
Coordenador do Curso de Química
Portaria R. 620/2018

Rosana M. N. de Assunção

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
Diretora do Instituto de Ciências Exatas e Naturais do Pontal - ICENP.
Portaria R. 501/2018



Documento assinado eletronicamente por **Hugo de Souza Rodrigues, Coordenador(a)**, em 15/10/2018, às 16:40, 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 **Rosana Maria Nascimento de Assunção, Diretor(a)**, em 15/10/2018, às 16:41, 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 **0765782** e o código CRC **F241CE3A**.