



UNIVERSIDADE ESTADUAL DO CENTRO-OESTE

Reconhecida pelo Decreto Estadual nº 3.444, de 8 de agosto de 1997

Ano	2023
Tp. Período	Primeiro semestre
Curso	QUÍMICA - BACHARELADO (290)
Disciplina	2507 - QUÍMICA QUÂNTICA
Turma	QBI

Carga Horária: 68

PLANO DE ENSINO

EMENTA

Conceitos matemáticos: funções e equações de autovalores. Modelo Atômico de Bohr. A teoria quântica. Postulados da mecânica quântica. Aplicações: elétron na caixa unidimensional. Princípio da incerteza de Heisenberg. Introdução a espectroscopia rotacional e vibracional.

I. Objetivos

Introduzir os conceitos matemáticos de operadores e equações de autovalores. Apresentar aos alunos uma introdução dos conceitos da Mecânica Quântica e sua formulação matemática. Demonstrar a condição de quantização. Demonstrar a origem dos números quânticos. Relacionar o conceito de orbital a uma função matemática. Apresentar e discutir os postulados da mecânica quântica. Apresentar a equação de Schrödinger. Discutir o Princípio da Incerteza de Heisenberg. Apresentar uma introdução de espectroscopia rotacional e vibracional, pelos modelos do rotor rígido e do oscilador harmônico.

II. Programa

- 2.1. CONCEITOS MATEMÁTICOS
 - 2.1.1 Números Complexos
 - 2.1.2 Operadores
 - 2.1.3 Equação de autovalor
- 2.2. INTRODUÇÃO À TEORIA QUÂNTICA
 - 2.2.1 Postulados da Mecânica Quântica
 - 2.2.2 Aplicações dos Postulados da Mecânica Quântica
 - 2.2.3 O Princípio da Incerteza de Heisenberg
 - 2.2.4 A Equação de Schrödinger
 - 2.2.5 O átomo de hidrogênio
 - 2.2.6 Os números quânticos
 - 2.2.7 A função de onda do átomo de hidrogênio $\psi_{n,l,m}$.
 - 2.2.8 A função de distribuição radial
 - 2.2.9 A função de distribuição angular
- 2.3. ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL E ROTACIONAL
 - 2.3.1 O Rotor Rígido
 - 2.3.2 Espectroscopia rotacional
 - 2.3.3 O Oscilador Harmônico
 - 2.3.4 Espectroscopia vibracional

III. Metodologia de Ensino

Aulas expositivas, utilizando quadro de giz e retro-projetor, listas de exercícios corrigidas e discutidas em sala de aula.

IV. Formas de Avaliação

Três avaliações durante o semestre e exercícios semanais para fixar o conteúdo. O acadêmico que não conseguir alcançar média igual ou superior a 5, inferior a 7, não terá direito a recuperação, enquanto aqueles que alcançarem média igual ou superior a 7 estarão aprovados.

V. Bibliografia

Básica

- ATKINS, P. W., Physical Chemistry, Oxford University Press, 8ª Ed.
- LEVINE, I. N., Physical Chemistry, McGraw-Hill International Editions, 3ª ed.
- MOORE, W.J. Físico-Química. 4. ed. São Paulo: Editora Edgard Blücher Ltda, 1976.

Complementar

- EISBERG, R. e RESNICK, R., Física Quântica, Editora Campus, 15ª ed.
- HANNA, M. W, Quantum Mechanics in Chemistry, The Benjamin/Cummings Publishing Company, 3ª ed.
- SCHATZ, G. C. e RATNER, M. A., Quantum Mechanics in Chemistry, Prentice-Hall International.
- MOORE, W. J., Físico-Química, Editora Edgar Blücher Ltda., 4ª ed.
- BARROW, G. M. Physical Chemistry. 6. ed. Oxford: Butterworth Heinemann, 1999.

APROVAÇÃO

Inspetoria: DEQ/G
Tp. Documento: Ata Departamental



UNIVERSIDADE ESTADUAL DO CENTRO-OESTE

Reconhecida pelo Decreto Estadual nº 3.444, de 8 de agosto de 1997

Ano	2023
Tp. Período	Primeiro semestre
Curso	QUÍMICA - BACHARELADO (290)
Disciplina	2507 - QUÍMICA QUÂNTICA
Turma	QBI

Carga Horária: 68

PLANO DE ENSINO

Documento: 536
Data: 01/06/2023