UFES CEUNES

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO UNIVERSITÁRIO NORTE DO ESPÍRITO SANTO
Curso de Engenharia Química

PROGRAMA DE DISCIPLINA

CAMPUS: **São Mateus**

CURSO: **Licenciatura em Química**

HABILITAÇÃO: **Licenciatura em Química**

OPÇÃO:-

DEPARTAMENTO RESPONSÁVEL: **Ciências Naturais (DCN)**

IDENTIFICAÇÃO: **Profª Carla da Silva Meireles**

CÓDIGO	DISCIPLINA OU ESTÁGIO				PERIODIZAÇÃO IDEAL
DCN 10093	**Introdução à Físico-Química Quântica**				**6º Período**
OBRIG./OPT.	PRÉ/CO/REQUISITOS				ANUAL/SEM.
OBRIG.					**2014/01**
CRÉDITO	CARGA HORÁRIA TOTAL	DISTRIBUIÇÃO DA CARGA HORÁRIA			
		TEÓRICA	EXERCÍCIO	LABORATÓRIO	OUTRA
04	**60**	**60**	**0**	---	---

NÚMERO MÁXIMO DE ALUNOS POR TURMA

AULAS TEÓRICAS	AULAS DE EXERCÍCIO	AULAS DE LABORATÓRIO	OUTRA
60	**60**	---	---

OBJETIVOS (Ao término da disciplina o aluno deverá ser capaz de :)

Introduzir os conceitos fundamentais da química quântica permitindo um entendimento mais detalhado da matéria e das reações químicas. Relacionar os métodos da Química Quântica, e sua aplicação na previsão de propriedades e no tratamento de problemas químicos.

EMENTA

Conceito. Energia total e Hamiltoniana. Postulados fundamentais. Equação de Schrodinger. Funções de onda. Aplicações da teoria quântica. Estrutura atômica e espectro do hidrogênio. Procedimento de Hartree-Fock. Espectro de átomos complexos. Termos espectroscópicos e regras de seleção. Orbitais moleculares. Teoria das bandas. Funções de partição. Estados e níveis de energia.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO (Título e descriminação das unidades)

1- Origem da mecânica quântica
   - Espectro do corpo negro, o efeito fotoelétrico e o princípio da incerteza
   - Dualidade onda-partícula
   - Conceitos e postulados
2- Equação de Schrödinger
   - Função de onda

- Interpretação de Born para função de onda
- Função densidade de probabilidade
- Normalização e Quantização

3- Aplicações da teoria quântica

- Partícula livre
- Partícula na caixa Unidimensional
- Átomo de hidrogênio, formas de energia molecular e energias de translação, rotação e vibração.
- Procedimento de Hartree-Fock

4- Espectro de átomos complexos

- Termos espectroscópicos e regras de seleção
- Espectros rotacional e vibracional

5- Orbitais moleculares,

- Estrutura molecular .
- Teoria das bandas.
- Funções de partição.
- Estados e níveis de energia.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

1. ATKINS, P. W., Physical Chemistry, 5a edição, Oxford University Press.
2. HOLLAUER, Eduardo. **Química quântica.** Rio de Janeiro: LTC 2008. xxiii, 475 p. ISBN 9788521615330
3. TRSIC, Milan; PINTO, Melissa F. Siqueira. **Química quântica:** fundamentos e aplicações. Barueri, SP:Manole, 2009. xv, 154 p. ISBN 9788520427668

Complementar:

BALL, D. W. Físico-Química, volume 1 e 2, São Paulo: Thomson, 2005.

CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO DA APRENDIZAGEM

O aluno será avaliado por uma prova, um seminário e atividades em sala de aula. O aluno que obtiver média parcial maior ou igual a sete ($MP \geq 7$ sete) estará aprovado. Caso contrário, ele fará uma prova

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO UNIVERSITÁRIO NORTE DO ESPÍRITO SANTO
Curso de Engenharia Química

final PF. A média final MF é igual a $MF = \frac{MP + PF}{2}$. Se a média final for maior ou igual a cinco ($MF \geq 5$) ele estará aprovado. Caso contrário, ele estará reprovado por nota.

OBSERVAÇÕES:

1-O aluno que obtiver freqüência inferior a 75% das aulas previstas estará reprovado por falta, independente de suas avaliações.

2-O aluno que faltar em uma das provas, necessariamente deverá apresentar atestado médico.

APROVAÇÃO (Número dos respectivos documentos)

CÂMARA DEPARTAMENTAL	COLEGIADO DE CURSO	CONSELHO DEPARTAMENTAL

Prof.ª Carla da Silva Meireles
Físico-Química
SIAPE: 1903932
DCN /CEUNES / UFES

Carla da Silva Meireles

Professora: Carla da Silva Meireles.
Departamento de Ciências Naturais