



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO

SECRETARIA DE EDUCAÇÃO PROFISSIONAL E TECNOLÓGICA

INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DO SERTÃO PERNAMBUCANO

CAMPUS FLORESTA

PROGRAMA DE DISCIPLINA

CURSO	FUNDAMENTOS DE QUÍMICA QUÂNTICA		
PROFESSOR	ANDERSON DOS REIS ALBUQUERQUE	ANO	2017.2

Código	Turma	Disciplina	Carga Horária	
			Semanal ¹	Total ²
1011	2014.2	FUNDAMENTOS DE QUÍMICA QUÂNTICA	2	40

¹Número de aulas semanais; ² Total de horas da Disciplina;

Ementa

Introdução e origem da Mecânica Quântica, seus postulados e experimentos relacionados, e aplicações em Química: dinâmica de sistemas microscópicos, movimentos translacional, rotacional e vibracional, estrutura atômica de átomos hidrogenóides e multieletrônicos; ligações químicas na visão quântica: Teoria de Ligação de Valência e Teoria dos Orbitais Moleculares.

Objetivos

- Compreender os fundamentos e princípios da mecânica quântica
- Compreender a dinâmica de sistemas microscópicos;
- Compreender a estrutura eletrônica de átomos hidrogenóides;
- Compreender a estrutura eletrônica de átomos multieletrônicos;
- Compreender as teorias de ligação química na visão quântica;

Conteúdo Programático

Rua Projetada, s/n – Caetano II – Floresta - PE – CEP: 56400-000

Fone/Fax: (87) 3877-2797 – www.ifsertao-pe.edu.br



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO

SECRETARIA DE EDUCAÇÃO PROFISSIONAL E TECNOLÓGICA

INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DO SERTÃO PERNAMBUCANO

CAMPUS FLORESTA

1ª Unidade: Teoria Quântica: Introdução e Princípios

1.1 Introdução à Química Quântica / Origem da Mecânica Quântica

1.1.1 Falhas da Física Clássica

1.1.2 Dualidade Partícula-Onda

1.2 Dinâmica de Sistemas Microscópicos

1.2.1 A equação de Schrödinger

1.2.2 A interpretação de Born da função de onda

1.2.3 Informações contidas na função de onda

1.2.4 O princípio da Incerteza

1.3 Postulados da Mecânica Quântica

2ª Unidade: Teoria Quântica: Técnicas e Aplicações

2.1 Movimento de translação: modelo da partícula na caixa

2.2 Movimento em uma e duas dimensões

2.3 Tunelamento

2.4 Movimento vibracional: níveis de energia e as funções de onda

2.5 Movimento rotacional: partículas em anéis e esferas

2.6 O *spin* eletrônico

2.7 Confinamento quântico: *quantum dots*

3ª Unidade: Estrutura atômica e espectroscopia

3.1 Estrutura e espectro de átomos hidrogenóides

3.1.1 Orbitais atômicos e suas energias

3.1.2 Transições espectroscópicas e regras de seleção

3.2 Estrutura de átomos multieletrônicos

4ª Unidade: Estrutura molecular e teorias de ligação química

3.1 Aproximação de Born-Oppenheimer



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO

SECRETARIA DE EDUCAÇÃO PROFISSIONAL E TECNOLÓGICA

INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DO SERTÃO PERNAMBUCANO

CAMPUS FLORESTA

3.2 Teoria de Ligação de Valência

3.3 Teoria dos Orbitais Moleculares

3.4 Orbitais Moleculares em sistemas poliatômicos

3.5 Introdução à Química Quântica Computacional

Metodologia

As aulas serão ministradas de forma dialogada, como também através de aulas experimentais na forma de oficinas, estudos dirigidos, trabalhos em grupo e seminários, com a utilização das diversas tecnologias disponíveis.

Recursos Didáticos

Livros, projeção de slides, quadro branco, pincéis, apagador e experimentação em laboratório de informática

Instrumentos e critérios de avaliação

Avaliações escritas, seminários e relatórios de pesquisas relativos aos experimentos realizados em laboratório de informática. Como critério avaliativo será observado o domínio dos conteúdos nos seminários, coerência nos relatórios de pesquisa, respostas coerentes nas avaliações escritas e orais.

Bibliografia Básica

1. ATKINS, PETER W. Físico-química. 8ª Ed. Volumes 1 e 2, Rio de Janeiro: LTC, 1999.
2. LEVINE, IRA N. Physical Chemistry, 6ª Ed. Volumes 1 e 2, New York: McGrawHill, 2009.
3. MCQUARRIE, DONALD A.; SIMON, JOHN D. Physical Chemistry: A molecular approach. United States of America: University Science Books, 1997.

Rua Projetada, s/n – Caetano II – Floresta - PE – CEP: 56400-000

Fone/Fax: (87) 3877-2797 – www.ifsertao-pe.edu.br



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO

SECRETARIA DE EDUCAÇÃO PROFISSIONAL E TECNOLÓGICA

INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DO SERTÃO PERNAMBUCANO

CAMPUS FLORESTA

Bibliografia Complementar

1. ATKINS, PETER W. Físico-química - Fundamentos. 3a ed. Rio de Janeiro: LTC, 2003.
2. ATKINS, P.; JONES, L. Princípios de Química: Questionando a vida moderna e o meio ambiente. Porto Alegre: Bookman, 2001.
3. MOORE, WALTER J. Físico-química. 4a ed. Volume 1. São Paulo: Edgard Blücher, 1976.

Rua Projetada, s/n – Caetano II – Floresta - PE – CEP: 56400-000

Fone/Fax: (87) 3877-2797 – www.ifsertao-pe.edu.br