



## UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA

Autorizada pelo Decreto Federal Nº 77.496 de 27/04/76  
Reconhecida pela Portaria Ministerial Nº 874/86 de 19/12/86  
PRÓ-REITORIA DE ENSINO DE GRADUAÇÃO

### PLANO DE ENSINO

Semestre 6º

IDENTIFICAÇÃO		
CÓDIGO	DISCIPLINA	PRÉ-REQUISITOS
EXA 461	Introdução a Química Quântica	EXA 475, EXA 191, FIS 652
CURSO	DEPARTAMENTO	ÁREA
Licenciatura em Química	Ciências Exatas	Ciências da Natureza
CARGA HORÁRIA	PROFESSOR(A)	
T	45	José Vieira do Nascimento Júnior
P		
E		
		Ass.

### EMENTA

Noções de química quântica: Postulados de Schroedinger a Aplicações. Estruturas Atômicas e estruturas moleculares simples. Soluções exatas. Métodos de aproximação. Átomo de Hidrogênio. Átomos multi-eletrônicos. Métodos de estruturas moleculares.



## UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA

Autorizada pelo Decreto Federal Nº 77.496 de 27/04/76  
Reconhecida pela Portaria Ministerial Nº 874/86 de 19/12/86  
PRÓ-REITORIA DE ENSINO DE GRADUAÇÃO

### COMPETÊNCIAS/HABILIDADES

São aquelas previstas pelas Diretrizes Curriculares Nacionais dentre as quais destacam-se as competências para problematizar as diversas possibilidades de situações didáticas e pedagógicas que surgem das interações em sala de aula ou das necessidades da comunidade; do exercício da responsabilidade social e histórica de permitir a esperança real de uma vida melhor para as pessoas através da produção de novos saberes; da concepção, elaboração, planejamento e desenvolvimento de projetos didáticos que visem a atividades teóricas e laboratoriais em Química, aplicáveis aos níveis de ensino fundamental e médio.

Formalizar o comportamento dos sistemas químicos em nível quântico;

Usar e interpretar funções de onda para partículas sub-microscópicas

Descrever sistemas moleculares de acordos com o modelo atômico quântico-ondulatório

Interpretar espectros de espécies químicas

Descrever sistemas de acordo com o modelo de partícula confinada em poço infinito

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

ATIVIDADES/METODOLOGIAS

Nº DE HORAS



## UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA

Autorizada pelo Decreto Federal Nº 77.496 de 27/04/76

Reconhecida pela Portaria Ministerial Nº 874/86 de 19/12/86

### PRÓ-REITORIA DE ENSINO DE GRADUAÇÃO

1. As origens da mecânica quântica:	Aulas expositivas; debates; pesquisa	3 h/aula
radiação do corpo negro e Quantização da Energia;	sobre temas relacionados; resolução de questões envolvendo cálculos. Debates envolvendo a formação/evolução das ideias em Quântica.	3 h/aula
2. A hipóteses de Planck, os efeitos foto-elétrico e Comptom reforçando a hipótese quântica,		6 h/aula
3. A dualidade partícula-onda e suas interpretações;		3 h/aula
4. O espectro do átomo de H segundo Bohr;		3 h/aula
5. Postulados da mecânica quântica;		3 h/aula
6. Observáveis e operadores: velocidade e momento de uma partícula;		3 h/aula
7. A equação de Schrodinger, interpretação probabilística, normalização e o princípio da incerteza de Heisenberg;		6 h/aula
8. Modelos quânticos: partícula na caixa unidimensional, movimentos vibracional [o problema de duas partículas e o oscilador harmônico] e rotacional [impacto sobre a nanociência –quantum <i>dots spin</i> ], o modelo para o átomo de H;		6 h/aula
9. Estruturas atômica e molecular e espectroscopia molecular rotacional e vibracional; momentos angulares orbital e spin;		3 h/aula
10. Teoria do orbital molecular para a molécula de H <sub>2</sub>		3 h/aula
11. Aplicações: microscopia eletrônica [tunelamento]; aplicação de lasers à química.		6 h/aula
<b>TOTAL</b>		<b>45 h/aula</b>



## **UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA**

Autorizada pelo Decreto Federal Nº 77.496 de 27/04/76  
Reconhecida pela Portaria Ministerial Nº 874/86 de 19/12/86  
**PRÓ-REITORIA DE ENSINO DE GRADUAÇÃO**

### **INTERFACES (explicitação das inter-relações entre as disciplinas, que podem ser previstas longitudinalmente no currículo)**

Os conteúdos deverão ser trabalhados tendo em vista as articulações entre os elementos do núcleo conceitual básico da Física e da Química, e dos conhecimentos do cálculo diferencial e integral aplicados às propriedades que caracterizam os sistemas quânticos. Analisar como a teoria quântica possibilitou o avanço da Ciência numa abordagem histórica e filosófica.

### **PROCESSO DE AVALIAÇÃO DA APRENDIZAGEM**

A avaliação, feita ao longo do processo de aprendizagem, contempla observações nos debates, aulas expositivas, resolução de questões, realização de seminários, redação de notas de aulas, etc. Os pontos serão computados em 10 [prova escrita]; 10 [resenha crítica escrita]; 10 [seminário].

### **RECURSOS DIDÁTICOS NECESSÁRIOS**

Lousa, pincel atômico, computador, projetor de imagem data show, internet, artigos e livros.



## UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA

Autorizada pelo Decreto Federal Nº 77.496 de 27/04/76  
Reconhecida pela Portaria Ministerial Nº 874/86 de 19/12/86  
PRÓ-REITORIA DE ENSINO DE GRADUAÇÃO

### BIBLIOGRAFIA DE ACORDO NBR 6023/2000

#### **Bibliografia Básica:**

BUNGE, A. V. - Introdução à Química Quântica, Editora Edgard Blücher, São Paulo, 1977.  
LEVINE, I.N. - Quantum Chemistry. 4.ed., Englewood Cliffs, Prentice Hall, 1991.  
ATKINS, P.W. - Physical Chemistry, 5 ed., Oxford, Oxford, 1994.

#### **Bibliografia Complementar:**

CHRISTOFFERSEN, R.E. - Basic Principles and Techniques of Molecular Quantum Mechanics. New York, Springer Verlag, 1989 (Springer Advanced Texts in Chemistry).  
D.A.McQuarrie, J.D.Simon - Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books, Sausalito, 1997.-  
ATKINS, P.W. - Molecular Quantum Mechanics. Oxford University Press, 1983. .  
HAYWORD, D.O. - Quantum Mechanics for Chemists. BPR Publishers, New Providence, 2002.

### HORÁRIO DO PROF. NO DEPARTAMENTO PARA ATENDIMENTO AOS ALUNOS (2h semanais)

Sala MP 54 – BOX 03  
Quinta-feira das 17h:30 às 18h:30  
Quarta-feira das 17h:30 às 18h:30