

Programa Analítico de Disciplina

QUI 251 - Físico-Química III

Departamento de Química - Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas

Catálogo: 2023

Número de créditos: 4

Carga horária semestral: 60h

Carga horária semanal teórica: 4h

Carga horária semanal prática: 0h

Carga horária de extensão: 6h

Semestres: II

Objetivos

Compreender o formalismo conceitual e matemático da Mecânica Quântica bem como sua importância para o desenvolvimento da Ciência e Tecnologia a partir do início do século XX. Ser capaz de utilizar a Mecânica Quântica para descrever quantitativamente a estrutura eletrônica de átomos e de fenômenos que não podem ser abordados unicamente pela Mecânica Clássica. Entender os modelos que descrevem os níveis de energia vibracionais e rotacionais de uma espécie molecular visando o estudo posterior da interação de moléculas com a radiação eletromagnética.

Ementa

Mecânica Quântica Antiga, Mecânica Quântica Moderna, Aplicações da Mecânica Quântica, Estrutura Atômica, Introdução à Estrutura Molecular

Atividades de Extensão

As atividades buscarão estimular as interações com disciplinas correlatas como matemática, física, engenharias, tecnologias diversas e outras. O objetivo será apresentar ao público externo à UFV como o formalismo conceitual e matemático da mecânica quântica pode ser associado ao nosso cotidiano, demonstrando sua importância para o desenvolvimento da ciência e tecnologia a partir do início do século XX. Serão propostas atividades de popularização da Ciência, incluindo: produção de material para divulgação da Físico-Química (vídeos, painéis, roteiros, *podcasts*, *slides*, etc), com apresentação e divulgação desses materiais para o público externo à UFV.

Pré e correquisitos

QUI 152 e QUI 153 e MAT 147 e (FIS 192 ou FIS 202)

Oferecimentos obrigatórios

Curso	Período
Química - Bacharelado	6

Oferecimentos optativos	
Curso	Grupo de optativas
Licenciatura em Química	Geral
Química - Licenciatura (Integral)	Geral

QUI 251 - Físico-Química III

Conteúdo					
Unidade	T	P	ED	Pj	To
1. Mecânica Quântica Antiga 1.1.1. Introdução: A Física do século XIX 1.2. Radiação e matéria (corpo negro) 1.3. Efeito fotoelétrico 1.4. Espalhamento Compton 1.5. Modelo atômico de Bohr 1.6. De Broglie e as ondas de matéria 1.7. O princípio da incerteza de Heisenberg	16h	0h	0h	0h	16h
2. Mecânica Quântica Moderna 1.2.1. Equação de Schrödinger 2.2. Propriedades da função de onda da matéria 2.3. Auto valores e valores médios 2.4. Princípio da Complementariedade	6h	2h	0h	0h	8h
3. Aplicações da Mecânica Quântica 1.3.1. A partícula livre 3.2. Degrau de Potencial-Energia da partícula abaixo do potencial 3.3. Degrau de Potencial-Energia da partícula acima do potencial 3.4. Barreira de Potencial-Energia da partícula abaixo do potencial-Tunelamento 3.5. Barreira de Potencial-Energia da partícula acima do potencial 3.6. Partícula na caixa unidimensional 3.7. Partícula na caixa bidimensional e tridimensional	12h	4h	0h	0h	16h
4. Estrutura Atômica 1.4.1. Aproximação do Born-Oppenheimer 4.2. Resolução do Átomo de Hidrogênio 4.3. Energias e Funções de onda para o átomo 4.4. O momento angular e o acoplamento Spin-Órbita	12h	0h	0h	0h	12h
5. Introdução à Estrutura Molecular 1.5.1. Modelo do Rotor Rígido-Energias Rotacionais 5.2. Modelo do Oscilador Harmônico-Energias Vibracionais	8h	0h	0h	0h	8h
Total	54h	6h	0h	0h	60h

Teórica (T); Prática (P); Estudo Dirigido (ED); Projeto (Pj); Total (To);

Planejamento pedagógico	
Carga horária	Itens
Teórica	Apresentação de conteúdo oral e escrito em quadro convencional
Prática	<i>Não definidos</i>
Estudo Dirigido	<i>Não definidos</i>
Projeto	<i>Não definidos</i>
Recursos auxiliares	<i>Não definidos</i>

QUI 251 - Físico-Química III**Bibliografias básicas**

Descrição	Exemplares
ATKINS, P. W.; de PAULA, J. Físico-Química, 9ª ed., vol.2, Rio de Janeiro: LTC, 2012	0
EISBERG, R. M.; RESNICK, R. Física Quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas, Rio de Janeiro: Elsevier, 1979.	0
EISBERG, R.; RESNICK, R. Física Quântica. 4ª ed. Rio de Janeiro: Campus, 1986. 928p.	0
LEVINE, I. N. Physical Chemistry, 3ª.ed., New York, Mc Graw-Hill, 1995.	0
LEVINE, I. N. Physical Chemistry, 4ª.ed., New York, Mc Graw-Hill, 1995.	0
LEVINE, I. N. Physical Chemistry, 6ª.ed., New York, Mc Graw-Hill, 2009.	0

Bibliografias complementares

Descrição	Exemplares
ALBERTY, R. Physical chemistry. New York: Jhon Wiley, 1983. 824p.	0
MOORE, W.J. Físico Química. São Paulo: Edgar Blucher, 1976. 950p. 2 v.	0
PILLAR, F. Elementary quantum chemistry. New York: McGraw-Hill, 1968.	0
DENIELS, F.; ALBERTY, R. Physical chemistry, 3ª ed., New York: Wiley, 1966.	0
BRAGA, J. P.; SCHOR, H. H. R. Estudo semi-clássico das colisões átomo-molécula triatômica (Grupo D infinito h), tese, UFMG, Belo Horizonte, 1982.	0
BRAGA, J. P. Fundamentos de Química Quântica, Viçosa: Editora UFV, 2007.	0