



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE CIÊNCIAS INTEGRADAS DO PONTAL
CURSO DE GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

FICHA DE DISCIPLINA

DISCIPLINA: Química Quântica e Espectroscopia

| | | | | |
|--|--|-----------------------------|----------------------------|------------------|
| CÓDIGO: | UNIDADE ACADÊMICA: FACIP | | | |
| PERÍODO/SÉRIE: 7º | | | | |
| OBRIGATÓRIA <input checked="" type="checkbox"/> (X) | OPTATIVA <input type="checkbox"/> () | C.H. TOTAL TEÓRICA 60 | C.H. TOTAL PRÁTICA 0 | C.H. TOTAL 60 |

OBS:

PRÉ-REQUISITOS:

Cálculo Diferencial e integral II

CÓ-REQUISITOS:

OBJETIVOS

Compreender os fundamentos da mecânica quântica e a sua utilização para o estudo da estrutura eletrônica de átomos e moléculas. Fornecer as bases teóricas de algumas técnicas espectroscópicas

EMENTA

1. Origens da mecânica quântica
2. Linguagem matemática de mecânica
3. Teoria quântica
4. Soluções exatas analíticas da equação de Schrödinger
5. Estrutura eletrônica de átomos e moléculas
6. Introdução à espectroscopia
7. Recursos computacionais

DESCRIÇÃO DO PROGRAMA

1. **Origens da mecânica quântica:** Limitações da física clássica: Radiação do corpo negro; Distribuição de Planck; Efeito fotoelétrico; Espectro atômico e molecular.
2. **Linguagem matemática de mecânica quântica:** espaços vetoriais, operadores, valores médios.
3. **Teoria quântica:** Equações de Schrödinger dependente e independente do tempo. Postulados da mecânica quântica. Interpretação da função de onda. Quantização., Princípio da Incerteza de Heisenberg.
4. **Soluções exatas analíticas da equação de Schrödinger:** partícula livre e partícula na caixa.

- Degenerescência. Oscilador Harmônico. Rotor rígido. Vibrações e rotações em moléculas. Átomo de hidrogênio. Momento angular. Spin eletrônico. Princípio da Exclusão de Pauli.
- 5. Estrutura eletrônica de átomos e moléculas:** Estrutura eletrônica de átomos hidrogenóides. Orbitais atômicos: forma, energias e interpretação física. Energias de ionização e espectros. Espectros de átomos polieletônicos e moléculas. Estados eletrônicos singlete e triplete. Acoplamento spin-órbita. Momento angular total e as regras de Russel-Saunders. Efeito Zeeman.
- 6. Introdução à espectroscopia:** rotacional, vibracional e eletrônica.
- 7. Recursos computacionais:** Utilização de softwares para cálculos de propriedades atômicas e moleculares.

BIBLIOGRAFIA

Bibliografia básica:

- ATKINS, P. W. Físico-Química. 8^a edição. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, **2008**. Volumes 1 e 2.
- McQUARRIE, D. A.; SIMON, J. D. Physical Chemistry - A Molecular Approach. California: University Science Books, **1997**.
- LEVINE, I. N. Quantum Chemistry. Prentice Hall, **2008**.

Bibliografia complementar:

- BLINDER, S.M. Introduction to quantum mechanics: in chemistry, material science, and biology. Amsterdam: Elsevier, **2004**.
- HIRST, D.M. A Computational Approach to Chemistry, Blackwell Scientific Publications, England, **1990**.
- CAFFERY, M.I., DOBOSH, P.A., RICHARDSON, D.M., Laboratory Exercises using Hyperchemistry – Tutorials for Molecular Modelling, Hypercube, **1998**.
- HEHRE, W. J., YU, J., KLUNZINGER, P. E., LOU, L., A Brief Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations, Wavefunction, Inc., USA, **1998**.
- FORESMAN, J.B., FRISCH, ÅE., Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods 2a Edição, Gaussian, Inc., USA, **1996**.

APROVAÇÃO

____ / ____ / ____

Carimbo e assinatura do Coordenador do Curso

____ / ____ / ____

Carimbo e assinatura do Diretor da FACIP