

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Componente Curricular: QUÍMICA QUÂNTICA E ESPECTROSCOPIA

Carga Horária: 60 horas.

Numero de Créditos: 04

Pré-Requisitos: CÁLCULO III e FÍSICA III

Público-alvo: Bacharelado em Química.

OBJETIVOS: Introduzir os conceitos fundamentais da mecânica quântica. Demonstrar como essa teoria é utilizada para explicar a estrutura de átomos e moléculas e suas propriedades. Apresentar as Teorias do Orbital Molecular e da Ligação de Valência. Apresentar o formalismo utilizado na espectroscopia eletrônica, vibracional e rotacional bem como suas utilizações na obtenção de informações sobre a identidade, a estrutura e os níveis de energia. Espectroscopia fotoeletrônica. Dar início ao uso de ferramentas computacionais para resolução de problemas numéricos e algébricos.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Compreender a utilização da mecânica quântica para descrever o comportamento de partículas elementares. Saber interpretar a equação de Schrödinger, bem como, seus resultados. Conhecer as Teorias do Orbital Molecular e da Ligação de Valência. Ter a habilidade que o capacite a compreender e interpretar os valores das energias dos níveis translacional, rotacional, vibracional e eletrônico, correlacionando-os com seus respectivos espectros. Possuir capacidade de compreender as regras de seleção e saber obter, através do grupo pontual da molécula e da tabela de caracteres, as transições permitidas. Ter habilidade para estabelecer relações entre a estrutura eletrônica e as propriedades dos materiais. Espectroscopia fotoeletrônica. Saber usar ferramentas computacionais para resolução de problemas numéricos e algébricos.

EMENTA / PROGRAMA

Introdução a Mecânica Quântica: Quantização da energia (radiação do corpo negro, efeito fotoelétrico, átomo de Bohr); postulados da mecânica quântica; função de onda e sua interpretação; equação de Schrödinger e sua interpretação (partícula na caixa e oscilador harmônico); átomo de hidrogênio (soluções radial e angular e suas implicações). Teoria do Orbital Molecular e Teoria da Ligação de Valência.

Espectroscopia: Aspectos Gerais (absorção e emissão de radiação, transições e regras de seleção geral); Espectro Vibracional (modelo do oscilador harmônico, níveis de energia, definição de modos normais de vibração e regra de seleção); Espectro Rotacional (modelo do rotor rígido, níveis de energia rotacionais, momento de inércia e constantes rotacionais); Espectro Roto-Vibracional (acoplamento dos movimentos, definição das bandas de origem, estrutura do espectro); Espectro Eletrônico (transições eletrônicas, fluorescência e fosforescência, fator de Franck-Condon).

METODOLOGIA

Aulas expositivas e de exercícios, uso de ferramentas computacionais.

AVALIAÇÃO :

Realização de exercícios, provas escritas e seminários.

BIBLIOGRAFIA

1. ATKINS P. W. & PAULA J., *Físico-Química*, vol. 2, 7ª. Ed., LTC editora, 2002.
2. LEVINE I. R., *Quantum Chemistry*, 4ª. Ed, Prentice Hall, New Jersey, 1991.
3. LEVINE I. R., *Molecular Spectroscopy*, Wiley & Sons, NY, 1975.
4. MCQUARRIE, D.A., SIMON, J.D., "Physical Chemistry: A Molecular Approach", University Science Books, N.Y., 1997
5. BARROW G. M., *Introduction to Molecular Spectroscopy*, McGraw-Hill Publishing Company, New York, NY, 1962.