



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Campus Universitário-Trindade - 88040-900 - Florianópolis - SC - Brasil
Fone: (048) 3721-6845 - Fax: +55 48 3721 6852 - E-mail: secretar@qmc.ufsc.br

DISCIPLINA: Fundamentos de Química Quântica e Espectroscopia

CÓDIGO: QMC 5403

CARGA HORÁRIA: 72 HORAS/AULA

PRÉ-REQUISITO:

EMENTA

Radiação do corpo negro, efeito fotoelétrico, equações de Planck, dualidade onda-partícula, átomos de Bohr, espectro do hidrogênio, fórmula de Rydberg princípio da incerteza, equação de Schrödinger, postulados e princípios gerais da mecânica quântica, operadores, equações de autovalor, autofunções, partícula nas caixas 1d e 3D, momento angular, oscilador harmônico, rotor rígido, átomo de hidrogênio, átomos hidrogeniônicos, spin eletrônico e o princípio da exclusão de Pauli. Átomos multieletrônicos, termos espectroscópicos, estrutura eletrônica de moléculas diatômicas, teoria de orbitais moleculares OM, estrutura eletrônica de moléculas poliatômicas, teoria de grupos, espectroscopia molecular, ressonância magnética nuclear, espectroscopia de lasers.

PROGRAMA

- 1.0) A equação de Schrödinger
 - 1.1 A fundamentação histórica da mecânica quântica.
 - 1.2 Princípio da incerteza de Heisenberg.
 - 1.3 A equação de ondas clássica
 - 1.4 A equação de Schrödinger independente do tempo.

- 2.0) A partícula na caixa
 - 2.1 A partícula livre
 - 2.2 A partícula nas caixas uni, bi e tri-dimensionais

- 3.0) Operadores
 - 3.1 Autofunções e autovalores
 - 3.2 Valores médios
 - 3.3 Funções de onda aceitáveis

- 4.0) Postulados e teoremas da mecânica quântica
 - 4.1 operadores hermitianos
 - 4.2 Expansões de autofunções
 - 4.3 Comutadores
 - 4.4 Superposição de estados
 - 4.5 Posição de autofunções

- 5.0) O momento angular
 - 5.1 Medidas simultâneas de várias propriedades
 - 5.2 Momento angular de sistemas de uma partícula
 - 5.3 Método de operadores escada para o momento angular

- 6.0) O oscilador harmônico e o rotor rígido como modelos espectroscópicos
 - 6.1 Oscilador harmônico unidimensional
 - 6.2 Os níveis de energia do oscilador harmônico
 - 6.3 O modelo do oscilador harmônico e o espectro de infravermelho de moléculas diatômicas
 - 6.4 Funções de onda do oscilador harmônico e os polinômios de Hermite
 - 6.5 Rotor rígido (introdução ao sistemas de coordenadas esféricas e derivação do Laplaciano).
 - 6.6. Os níveis de energia do rotor rígido.
 - 6.7. O rotor rígido como um modelo para rotações em moléculas diatômicas.

- 7.0) O átomo de hidrogênio
 - 7.1 Problema da força central de uma partícula
 - 7.2 Separação de variáveis – sistema de partículas não-interagentes
 - 7.3 Redução do problema de 2 partículas para 1 partícula
 - 7.4 Funções de onda do estado fundamental
 - 7.5 Orbitais hidrogenóides

- 8.0) O spin eletrônico e o princípio da exclusão de Pauli
 - 8.1 Spin eletrônico
 - 8.2 O spin e o átomo de hidrogênio
 - 8.3 Princípio da exclusão de Pauli
 - 8.4 O determinante de Slater

- 9.0) A estrutura eletrônica de moléculas diatômicas
 - 9.1 A aproximação de Born-Oppenheimer
 - 9.2 O movimento nuclear
 - 9.3 A molécula íon de hidrogênio – H_2^+
 - 9.4 A teoria dos orbitais moleculares – OM

- 10.0) A estrutura eletrônica de moléculas poliatômicas
 - 10.1 Os orbitais híbridos
 - 10.2 Elétrons de ligações e pares isolados
 - 10.3 Espectroscopia de fotoelétrons e os orbitais moleculares

- 11.0) Espectroscopia Molecular
 - 11.1 Processos moleculares e o espectro eletromagnético
 - 11.2 transições rotacionais e vibracionais
 - 11.3 Espacamento de linhas no espectro roto-vibracional – ramos P e R
 - 11.4 Princípio Frank Condon
 - 11.5 Vibrações em moléculas poliatômicas
 - 11.6 Regras de Seleção.

- 12.0) Introdução às espectroscopias de ressonância magnética nuclear e Lasers
 - 12.1 Spin nuclear.
 - 12.2 Interações entre momentos magnéticos e campos magnéticos.
 - 12.3 Espectrômetros de RMN
 - 12.4 Deslocamentos químicos
 - 12.5 acoplamentos spin-spin
 - 12.6 Regra $n+1$
 - 12.7 Moléculas excitadas eletronicamente.

- 12.8 Transições eletrônicas e leis de velocidade.
- 12.9 Inversão de população
- 12.10 exemplos de lasers, He-Ne
- 12.11 Lasers e processos fotoquímicos

BIBLIOGRAFIA

- 1.0 **McQuarrie, D. A.; Simon, *Physical Chemistry: A Molecular Approach*, 1st. Ed. University Science Books, California, 1997.**
- 2.0 **McQuarrie, D. A.; *Quantum Chemistry*, 1st. Ed. University Science Books, California, 1983.**
- 3.0 **Levine, I.; *Quantum Chemistry*, 6th Ed. Prentice Hall, NY, 2008.**
- 4.0 Pauling, L.; Wilson, B. Jr.; *Introduction to Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, NY, 1935.
- 5.0 Mueler, M; *Fundamentals of Quantum Chemistry – Molecular Spectroscopy and Modern Electronic Structure Computation*, 1st. Ed., Kluwer Academic Publishers, NY, 2002.
- 6.0 Pilar, F. L.; *Elementary Quantum Chemistry*, 2nd Ed. McGraw-Hill, NY, 1970.
- 7.0 Karplus, M.; Porter, R.N.; *Atoms and Molecules*, Benjamin, NY, 1970.
- 8.0 ATKINS, P.W.; de Paula, J.; *Physical Chemistry*, 8th. Ed. Oxford University Press, 2006.
- 9.0 ATKINS, P. W., *Físico-Química, Volume 1, Sétima Edição*, Oxford University Press, 2003.