



CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

DISCIPLINA: 3237 QUÍMICA QUANTICA E ESPECTROSCOPIA

CARGA HORARIA: 102

***EMENTA

NOÇÕES DE MECÂNICA QUÂNTICA. FUNDAMENTOS DE ESPECTROSCOPIA.

APROVADA ATRAVÉS DA RESOLUÇÃO NÚMERO 182/2005-CEP.

***OBJETIVO

CAPACITAR O ALUNO PARA A COMPREENSÃO DOS FUNDAMENTOS FÍSICOS, MATEMÁTICOS E QUÍMICOS DA MATÉRIA.

***PROGRAMA

ORIGENS DA TEORIA QUÂNTICA:

1. RADIAÇÃO DO CORPO NEGRO.

1.2. LEIS DE WIEN E DE STEFAN-BOLTZMANN.

1.3. LEI DE RAYLEIGH-JEANS.

1.4. DISTRIBUIÇÃO DE PLANCK PARA A RADIAÇÃO DO CORPO NEGRO.

1.5. CAPACIDADES CALORÍFICAS DOS CORPOS.

1.6. EFEITO FOTOELÉTRICO E EFEITO COMPTON.

2. EQUAÇÕES DE ONDA E A EQUAÇÃO DE SCHROEDINGER:

2.1. OPERADORES, AUTO-FUNÇÕES E AUTO-VALORES.

2.2. INTERPRETAÇÃO DE MAX BORN PARA A FUNÇÃO DE ONDA.

2.3. VALORES MÉDIOS E VALORES ESPERADOS.

3. OS POSTULADOS DA MECÂNICA QUÂNTICA.

4. APLICAÇÕES DA MECÂNICA QUÂNTICA:

4.1. MOVIMENTO TRANSIACIONAL — O PROBLEMA DA PARTÍCULA NA CAIXA.

4.2. MOVIMENTO EM DUAS E EM TRÊS DIMENSÕES.

4.3. DEGENERESCÊNCIA DE ESTADOS QUÂNTICOS.

4.4. TUNELAMENTO TRANSIACIONAL.

4.5. MOVIMENTO VIBRACIONAL — O OSCILADOR HARMÔNICO.

4.6. TUNELAMENTO VIBRACIONAL.

4.7. MOVIMENTO ROTACIONAL EM DUAS E EM TRÊS DIMENSÕES — OS HARMÔNICOS ESFÉRICOS.

4.8. FUNÇÕES DE DISTRIBUIÇÃO RADIAL E O ÁTOMO DE HIDROGÊNIO.

5. INTRODUÇÃO À ESPECTROSCOPIA:

5.1. O PRINCÍPIO DE FRANCK-CONDON.

5.2. OS COEFICIENTES DE EINSTEIN PARA EMISSÃO E ABSORÇÃO DE RADIAÇÃO.

5.3. ESPECTROSCOPIA NO ULTRA-VIOLETA/VISÍVEL.

5.4. FLUORESCÊNCIA, FOSFORESCÊNCIA E O DIAGRAMA DE JABLONSKI.

5.5. LASERS E SUAS APLICAÇÕES.

5.6. ESPECTROSCOPIA ROTACIONAL E AS REGRAS DE SELEÇÃO.

5.7. MOVIMENTO VIBRACIONAL E A ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL DE MOLÉCULAS DIATÔMICAS.

5.8. A EXTRAPOLAÇÃO DE BIRGE-SPONER.

5.9. ESPECTROSCOPIA RAMAN.

5.10. ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL DE MOLÉCULAS POLIATÔMICAS.

6. RESSONÂNCIA MAGNÉTICA:

6.1. RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR E DESLOCAMENTO QUÍMICO.



CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

DISCIPLINA: 3237 QUÍMICA QUANTICA E ESPECTROSCOPIA

CARGA HORARIA: 102

6.2. RMN COM TRANSFORMADA DE FOURIER.

6.3. A ESTRUTURA FINA DOS ESPECTROS DE RMN.

APROVADO PELO DEPARTAMENTO DE QUÍMICA EM, 27/06/2012.