



PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS

Disciplina	
Código	Nome
QF637	Introdução à Espectroscopia e à Termodinâmica Estatística

Vetor
OF:S-1 T:004 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:004 SL:004 C:004 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req	QF536 *F 428
---------	--------------

Ementa
Espectroscopia molecular. Espectroscopia de ressonância paramagnética de elétrons (ERP) e magnética nuclear (RMN). Lasers. Fotoquímica. Ensembles e postulados. Funções de partição e termodinâmica. Sistemas de partículas independentes: distinguíveis e indistinguíveis. Aplicações.

Programa
I. Introdução à Espectroscopia 1. Revisão de mecânica quântica: Postulados da mecânica quântica e equação de Schrodinger; Estados quânticos da partícula na caixa, átomo de H, osciladores harmônico e anarmônico, rotor rígido; Momentos angulares orbitais e magnéticos; spins. 2. Teoria de perturbação dependente do tempo (probabilidade de transição; momento de transição) 3. O espectro eletromagnético e interação da radiação com a matéria. 4. Espectroscopia rotacional 5. Espectroscopia rotovibracional (infravermelho e Raman) 6. Espectroscopia eletrônica (transições vibrônicas) 7. Lasers 8. Ressonância magnética nuclear e eletrônica 9. Fotoquímica e fotofísica 10. Espectros estacionários e espectroscopia resolvida no tempo
II. Introdução à Termodinâmica Estatística 1. Revisão de termodinâmica: 1a, 2a e 3a leis 2. Macroestados, microestados e configurações 3. Contagem de estados e entropia: Distribuição de Boltzmann; 4. Funções de partição e ensembles 5. Sistemas de Partículas Independentes 6. Gases ideais; Gases ideais poliatômicos 7. Equilíbrio químico: Uma visão microscópica detalhada

Bibliografia
1- Physical Chemistry: A Molecular Approach", D. A. McQuarrie e J. D. Simon. 2- Molecular Thermodynamics, D. A. McQuarrie e J. D. Simon. Scientific Books. 3- Statistical Mechanics, D. A. McQuarrie. 4- Physical Chemistry, R. A. Alberty & R. J. Silbey 5- Physical Chemistry, I. Levine.

Critérios de Avaliação

Critérios de avaliação definidos pelo Professor, com base no disposto na Seção I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliação do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduação. Frequência: 75 % (* O abono de faltas será considerado dentro do previsto no capítulo VI, seção X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduação)