

Código: QF530								
Nome: Introdução à Química Quântica e Espectroscopia Molecular								
Nome em Inglês: Introduction to Quantum Chemistry and Molecular Spectroscopy								
Nome em Espanhol: Introducción a la Química Cuántica y Espectroscopia Molecular								
Tipo de Disciplina: Semanal								
Tipo de Aprovação: Nota e Frequência								
Característica: Regular								
Frequência: 75%								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: Semestral / Todos os períodos								
Exige Exame: Sim								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
4	-	-	-	-	-	4	15	4
Ocorrência nos Currículos: 05, 50, 56								
Pré-requisitos: *MA311								
<p>Ementa: Noções de Espectroscopia e Postulados da mecânica quântica. Partícula na caixa e estrutura eletrônica. Rotor rígido e espectroscopia rotacional de moléculas diatômicas. Oscilador harmônico e espectroscopia vibracional de moléculas diatômicas. Espectroscopia roto-vibracional de moléculas diatômicas. Estrutura eletrônica, estados fundamental e excitados. Fotoquímica e fotofísica.</p>								
<p>Programa:</p> <ol style="list-style-type: none"> Noções de Espectroscopia e Postulados da mecânica quântica. Interação da radiação com a matéria: absorção, emissão, espalhamento e difração. Coeficientes de Einstein, noções sobre laser, momento de transição e regras de seleção, radiação do corpo negro e ondas de Broglie. Postulados da mecânica quântica: funções de onda bem-comportadas, operadores e cálculo de propriedades, equação de Schrödinger dependente do tempo e independente do tempo. Aplicações no modelo da partícula na caixa e relação com espectroscopia eletrônica. Espectroscopia Roto-Vibracional. Espectroscopia rotacional na região de microondas e noções sobre instrumentação. Modelo do rotor rígido, espectros de moléculas diatômicas e regras de seleção. Espectroscopia na região do infravermelho e noções sobre instrumentação. Modelo do oscilador harmônico e anarmônico. Análise de espectro roto-vibracional de moléculas diatômicas e regras de seleção. Espectroscopia Raman e regras de seleção. Estrutura Eletrônica. Instrumentação de espectroscopia UV-vis. O átomo de hidrogênio. Espectros de emissão e absorção eletrônicas e regras de seleção. Noção sobre o efeito Stark e Zeeman. Operador hamiltoniano para sistemas multieletrônicos. Spin, princípio de exclusão de Pauli e determinantes de Slater. Moléculas e a aproximação de Born-Oppenheimer. Noção sobre o método Hartree-Fock. Princípio variacional e combinação linear de orbitais atômicos. Aplicação em moléculas. O método de Hückel e sistemas pi. Espectroscopia de absorção e emissão UV-visível. Noções sobre fotoquímica e fotofísica. 								

Bibliografia Básica

- 1) MCQUARRIE, D. A.; SIMON, J. D. **Physical Chemistry: A Molecular Approach**. 1. Ed. Sausalito: University Science Books, 1997. 1360 p
- 2) BARROW, G. M. **Introduction to Molecular Spectroscopy**. 1. Ed. Tóquio: McGraw-Hill. 1962. 318 p
- 3) LEVINE, I. **Físico-Química**. 6. Ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2012. 2v 1008p

Bibliografia Complementar

- 1) SALA O., **Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho**. 2. Ed. São Paulo: Editora Unesp, 2011. 280 p
- 2) PAULING, L.; WILSON, E. B. **Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry**. 1. Ed. New York: McGraw-Hill, 1935. 468 p
- 3) HERZBERG, G. **Molecular spectra and molecular structure Volume I - Spectra of Diatomic Molecules**. 2. Ed. Malabar: Krieger Publishing. 1989. 660p
- 4) PAVIA, D.; LAMPMAN, G.; KRIZ, G.; VYVYAN, J. **Introdução à espectroscopia**. 2. Ed. São Paulo: Cengage Learning. 2015. 733p
- 5) ATKINS, P. W.; DE PAULA, J. **Físico-Química: fundamentos**. 9. Ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos. 2012. 2v. 948p