UNIVERSIDADE ESTADUAL DO CENTRO-OESTE – UNICENTRO

Centro Universitário de Guarapuava – Campus CEDETEG Departamento de Química – DEQ

CURSO: Química SÉRIE: 4^a SEMESTRE: 1 ANO: 2010

DISCIPLINA: Introdução à Química Quântica TURNO: Integral C/H SEMANAL: 04 CÓDIGO: 0971 C/H TOTAL: 68

EMENTA

Conceitos matemáticos: funções, equações de autovalores. Modelo Atômico de Bohr. A teoria quântica. Postulados da Mecânica Quântica. Aplicações: elétron na caixa unidimensional, Princípio da Incerteza deHeisenberg. Introdução à espectroscopia rotacional e vibracional.

I. OBJETIVOS:

Introduzir os conceitos matemáticos de operadores e equações de autovalores. Apresentar aos alunos uma introdução dos conceitos da Mecânica Quântica e sua formulação matemática. Demonstrar a condição de quantização. Demonstrar a origem dos números quânticos. Relacionar o conceito de orbital a uma função matemática. Apresentar e discutir os postulados da mecânica quântica. Apresentar a equação de Schrödinger. Discutir o Princípio da Incerteza de Heisenberg. Apresentar uma introdução de espectroscopia rotacional e vibracional, pelos modelos do rotor rígido e do oscilador harmônico. Introduzir conceitos de teoria de grupos e simetria em moléculas.

II. PROGRAMA

- 2.1. CONCEITOS MATEMÁTICOS
 - 2.1.1 Números Complexos
 - 2.1.2 Operadores
 - 2.1.3 Equação de autovalor
- 2.2. INTRODUÇÃO À TEORIA QUÂNTICA
 - 2.2.1 Postulados da Mecânica Quântica
 - 2.2.2 Aplicações dos Postulados da Mecânica Quântica
 - 2.2.3 O Princípio da Incerteza de Heisenberg
 - 2.2.4 A Equação de Schrödinger
 - 2.2.5 O átomo de hidrogênio
 - 2.2.6 Os números quânticos
 - 2.2.7~A função de onda do átomo de hidrogênio $\Psi_{n,l,m}$.
 - 2.2.8 A função de distribuição radial
 - 2.2.9 A função de distribuição angular
- 2.3. ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL E ROTACIONAL
 - 2.3.1 O Rotor Rígido
 - 2.3.2 Espectroscopia rotacional
 - 2.3.3 O Oscilador Harmônico
 - 2.3.4 Espectroscopia vibracional
- 2.4. INTRODUÇÃO À TEORIA DE GRUPOS
 - 2.4.1 Conceito de simetria
 - 2.4.2 Elementos e operações de simetria
 - 2.4.3 Grupos pontuais de moléculas

III. METODOLOGIA DE ENSINO

Aulas expositivas, utilizando quadro de giz e retro-projetor, listas de exercícios corrigidas e

discutidas em sala de aula.

IV. FORMAS DE AVALIAÇÃO

Provas para resolução em sala de aula, provas com consulta à bibliografia, prova oral, seminários.

V. BIBLIOGRAFIA

1. Básica

ATKINS, P. W., Physical Chemistry, Oxford University Press, 5^a Ed.

LEVINE, I. N., Physical Chemistry, McGraw-Hill International Editions, 3^a ed.

MOORE, W. J., Físico-Química, Editora Edgar Blücher Ltda., 4ª ed.

2. Complementar

EISBERG, R. e RESNICK, R., Física Quântica, Editora Campus, 15ª ed.

HANNA, M. W, Quantum Mechanics in Chemistry, The Benjamin/Cummings Publishing Company, 3^a ed.

SCHATZ, G. C. e RATNER, M. A., Quantum Mechanics in Chemistry, Prentice-Hall International.

VI. DISPONIBILIDADE NO ACERVO BIBLIOGRÁFICO DA UNICENTRO

1. Disponíveis

Todos disponíveis em biblioteca.

Professor respon	sável pela disciplin	a:	
		Prof. Ricardo Celeste	
Aprovado em :	/		
	, Folhas nº : amento: Marcos Ro		