



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
PRÓ-REITORIA DE ENSINO

PROGRAMA DE DISCIPLINA

Curso:	Química / Bacharelado		
Departamento:	Química		
Centro:	Ciências Exatas		
COMPONENTE CURRICULAR			
Nome: Química Quântica e Espectroscopia			Código: 3237
Carga Horária: 102	Periodicidade: modular	Ano de Implantação: 2010	
1. EMENTA			
Noções de mecânica quântica. Fundamentos de espectroscopia.			
2. OBJETIVOS			
Capacitar o aluno para a compreensão dos fundamentos físicos, matemáticos e químicos da matéria.			

3. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO
<ol style="list-style-type: none">1. Origens da teoria quântica:<ol style="list-style-type: none">1.1. 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.<ol style="list-style-type: none">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.<ol style="list-style-type: none">4.1. Movimento translacional – o problema da partícula na caixa.4.2. Movimento em duas e em três dimensões.4.3. Degenerescência de estados quânticos.4.4. Tunelamento.4.5. Movimento rotacional em duas e em três dimensões – os harmônicos esféricos.4.6. Funções de distribuição radial e o átomo de hidrogênio. 5. Introdução à espectroscopia.<ol style="list-style-type: none">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.

6.2. RMN com transformada de Fourier.

6.3. A estrutura fina dos espectros de RMN.

4. REFERÊNCIAS

4.1- Básicas (Disponibilizadas na Biblioteca ou aquisições recomendadas)

ATKINS, P.W., DE PAULA, J.; **Físico-Química**, 7^a ed., vol. 2., LTC, Rio de Janeiro, 2002.

ATKINS, P.W., DE PAULA, J.; **Físico-Química**, 8^a ed., vol. 2. GEN, Rio de Janeiro, 2008.

HOLLAUER, E., **Mecânica Quântica**; LTC, Rio de Janeiro, 2008.

MCQUARRIE, D.; **Quantum Chemistry**; University Science Books, Mill Valley, 1983.

BUNGE, A.; **Introdução à Química Quântica**, Edgard Blucher, São Paulo, 1977.

MOORE, W.J. **Físico-Química**. Vol. 2., 4^a ed., Edgard Blucher, São Paulo, 1976.

LEVINE, I.N., **Physical Chemistry**, 5^a ed., McGraw-Hill International Book Company, 2002.

4.2- Complementares

HANNA, M.W.; **Quantum Mechanics in Chemistry**; W.A. Benjamim, 1969.

SILVERSTEIN, R.M., BASSLER, G.C., MORRIL, T.C.; **Identificação Espectroscópica de Compostos Orgânicos**; 3^a ed., Guanabara Dois, 1969.

Aprovado em 30 de setembro 2009 (Ata 405).

Carimbo e Assinatura do Chefe do Departamento

Aprovação do Colegiado



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ
PRÓ-REITORIA DE ENSINO

CRITÉRIO DE AVALIAÇÃO DA APRENDIZAGEM

Curso:	Química / Bacharelado		
Departamento:	Química		
Centro:	Ciências Exatas		
COMPONENTE CURRICULAR			
Nome: Química Quântica e Espectroscopia		Código: 3237	
Turma(s): todas	Ano de Implantação: 2009	Periodicidade: modular	

Verificação da Aprendizagem			
www.pen.uem.br > Legislação > Normas da Graduação > Pesquisar por Assunto: Avaliação			
Obs.: Apresentar abaixo quantas avaliações serão exigidas e detalhar o processo de verificação da aprendizagem (provas, avaliação contínua, seminários, trabalhos etc.), para obtenção das notas periódicas e Avaliação Final. Número mínimo de avaliações = 2 (duas)			

Avaliação Periódica:	1ª	2ª	3ª
Peso:	1	1	1

1ª AVALIAÇÃO PERIÓDICA: Prova escrita, com valor de 0,0 (zero) a 10,0 (dez).

2ª AVALIAÇÃO PERIÓDICA: Prova escrita, com valor de 0,0 (zero) a 10,0 (dez).

3ª AVALIAÇÃO PERIÓDICA: Prova escrita, com valor de 0,0 (zero) a 10,0 (dez).

AVALIAÇÃO FINAL: Prova escrita, versando sobre o conteúdo programático.

Carimbo e Assinatura do Chefe do Departamento	Aprovação do Colegiado
---	------------------------