



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Campus Universitário-Trindade - 88040-900 - Florianópolis - SC - Brasil
Fone: (048) 3721-6852 - Fax: +55 48 3721 6852 - E-mail: secretar@qmc.ufsc.br

DISCIPLINA: Físico-Química Teórica C

CÓDIGO: QMC 5408

CARGA HORÁRIA: 72 HORAS/AULA

PRÉ-REQUISITO: QMC 5402

EMENTA

Química Quântica: conceito. Energia total e Hamiltoniana. A crise da física clássica. Álgebra de operadores. Postulados fundamentais. Equação de Schrodinger. Funções de onda. Aplicações da teoria quântica. Estrutura atômica e espectro do hidrogênio. Procedimento de Hartree-Fock. Espectro de átomos complexos. Termos espectroscópicos e regras de seleção. Orbitais moleculares. Teoria das bandas. Termodinâmica estatística: leis de distribuição. Funções de partição. Estados e níveis de energia. Entropia estatística. Cálculo de funções termodinâmicas.

OBJETIVOS: Apresentar conceitos fundamentais, bem como resolver problemas relacionados com a estrutura da matéria.

P R O G R A M A

I. QUÍMICA QUÂNTICA

1. Introdução: Conceito. Leis. Teoria científica. Eletrodinâmica e Mecânica. Evolução da Mecânica. Mecânica clássica. Energia total e Hamiltoniano. Trajetórias: translação, rotação, oscilação harmônica.
2. A Crise da Física Clássica: Radiação do corpo negro. Hipótese de Planck. Capacidades caloríficas. Efeito fotoelétrico. Efeito de Compton. Difração eletrônica. Relação de Broglie. Espectros atômicos e moleculares. Antiga teoria dos quanta: histórico e metodologia. Princípio de incerteza de Heisenberg.
3. Princípios de Mecânica Ondulatória: Álgebra de operadores. Conceitos fundamentais. Postulado fundamental. Interpretação de Born. Normalização. Convenções de transformação. Hermiticidade de um operador. Funções de bom comportamento. Equações de Schrödinger dependente do tempo e do estado estacionário. Forma hamiltoniana da função de onda.

Funções próprias e valores próprios. Degeneração de um valor próprio. Observáveis e valor esperado. Funções ortonormais. Operadores comutáveis.

4. Aplicações da Teoria Quântica: Partícula livre. Partícula numa caixa. Movimento em duas direções. Movimento vibratório. Movimento rotacional. Partícula numa esfera. Momento angular. Quantização espacial. Spin. Modelo vectorial.
5. Átomos. Estrutura e Espectros: Hidrogênio: espectro de emissão. Sistema de partículas. Átomo de hidrogênio: estrutura. Orbitais atômicos hidrogenados. Função de distribuição radial. Regras de seleção. Átomos com vários eletrons: estrutura. Princípio de exclusão de Pauli. Série de Clebsch - Gordon. Estados de spin total. Momento angular total. Princípio de construção (Aufbau). Regra de Hund. Orbitais do campo auto-consistente. Procedimento de Hartree-Fock. Espectros de átomos complexos. Interação spin-órbita. Símbolos dos termos e regra de seleção. Efeito campo magnético: Efeito Zeeman.
6. Estrutura Molecular: Molécula íon de hidrogênio. Aproximação de Born-Oppenheimer. Orbitais moleculares. Aproximação LCAO-MO. Orbitais de enlace e antienlace. Moléculas diatômicas homonucleares: hidrogênio e oxigênio. Ordem de enlace. Orbitais pares e ímpares. Moléculas diatômicas heteronucleares. Enlace polares. Métodos variacional. Teorema de Eckart. Hibridação. Molecular poliatômicas. Água. Hidrocarbonetos não saturados e aromáticos. Etileno. Aproximação de Hückel. Butadieno. Energia de localização. Benzeno. Aromaticidade. Metais. Teoria das bandas. Condutividade Elétrica. Isolantes. Semi-condutores. Dopantes. Teoria do enlace de valência (TEV). Comparação entre TEV e TOM. Benzeno: ressonância, estrutura de Dewar e formas iônicas.

II. TERMODINÂMICA ESTATÍSTICA

1. Lei de distribuição do Boltzmann. Populações. Configurações. Aproximação de Stirling. Função de partição molecular. Estados e níveis de energia. Função de partição translacional. ensemble canônico. Princípios de probabilidades iguais. Função de partição canônica. Entropia de um gás monoatômico.
2. Energia interna. Contribuição dos modos de movimento na função de partição. Contribuição translacional. Contribuição rotacional. Número de simetria. Contribuição vibracional. Moléculas poliatômicas. Contribuição eletrônica. Cálculo de funções termodinâmicas. Trabalho de Helmholtz. Pressão. Entalpia. Energia livre de Gibbs. Princípio de equipartição da energia e as energias médias. Capacidades colóricas. Temperatura rotacional característica. Contribuição vibracional a C_V . Temperatura vibracional característica. Constantes de equilíbrio. Bases físicas das constantes de equilíbrio.

BIBLIOGRAFIA:

1. Livro-texto: ATKINS, P. W., PHYSICAL CHEMISTRY, 5ª edição, Oxford University Press.

2. TEIXEIRA DIAS, J. J. C., Química Quântica, Fundação Calouste Gulbenkian.

3. BUNGE, A. V., Introdução à Química Quântica, Editora Edgard Blücher Ltda, 1977.

4. ATKINS, P. W., Molecular Quantum Mechanics, 2ª edição, Oxford University Press, 1983.

5. HOLLAS, J.M., Modern Spectroscopy, John Wiley & Sons, 1987.

6. McQUARRIE, D.A., Quantum Chemistry, University Science Books, 1983.

7. PEIXOTO, E.M.A., Teoria Quântica, 1988.

8) SALA, O., Fundamentos e Aplicações da Espectroscopia Raman e no Infravermelho, Editora da Unesp, 1996.