UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO UNIVERSITÁRIO NORTE DO ESPÍRITO SANTO
Departamento de Ciências Naturais
Rodovia BR 101 Norte, Km. 60, Bairro Litorâneo, CEP 29932-540, São Mateus – ES
Sítio eletrônico: http://www.ceunes.ufes.br

PROGRAMA DE DISCIPLINA

CURSO: Química – Licenciatura (São Mateus)					
CÓDIGO	DISCIPLINA OU ESTÁGIO				
DCN 10887	**Introdução à Físico Química Quântica**				
CARGA HORÁRIA SEMANAL	CARGA HORÁRIA TOTAL	DISTRIBUIÇÃO DA CARGA HORÁRIA			CRÉDITOS
		TEÓRICA	EXERCÍCIO	LABORATÓRIO	
04	**60**	**04**	**00**	**00**	**04**

EMENTA

Conceito. Energia total e Hamiltoniana. 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. Funções de partição. Estados e níveis de energia.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

Origem da mecânica quântica: Espectro do corpo negro, o efeito fotoétrico e o princípio da incerteza, Dualidade onda-partícula, Conceitos e postulados. **Equação de Schrödinger:** Função de onda,Interpretação de Born para função de onda,Função densidade de probabilidade, Normalização e Quantização. **Aplicações da teoria quântica:** Partícula livre, Partícula na caixa Unidimensional, Átomo de hidrogênio, formas de energia molecular e energias de translação, rotação e vibração. Procedimento de Hartree-Fock. **Espectro de átomos complexos:** Termos espectroscópicos e regras de seleção, Espectros rotacional e vibracional. **Orbitais moleculares:** Estrutura molecular, Teoria das bandas,Funções de partição, Estados e níveis de energia.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

Bibliografia de referência:

1. ATKINS, P. W., **Physical Chemistry**, 5a edição, Oxford University Press.
2. HOLLAUER, Eduardo. **Química quântica.** Rio de Janeiro: LTC 2008. xxiii, 475 p. ISBN 9788521615330
3. TRSIC, Milan; PINTO, Melissa F. Siqueira. **Química quântica:** fundamentos e aplicações. Barueri, SP:Manole, 2009. xv, 154 p. ISBN 9788520427668

Bibliografia Complementar:

1. BALL, D. W. **Físico-Química**, volume 1 e 2, São Paulo: Thomson, 2005.