

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Componente Curricular: INTRODUÇÃO À QUÍMICA QUÂNTICA

Carga Horária: 60 horas.

Numero de Créditos: 04

Pré-Requisitos: CÁLCULO DIFERENCIAL E INTEGRAL II E FÍSICA GERAL III

Público-alvo: Licenciatura em Química.

OBJETIVOS: Introduzir os conceitos fundamentais da mecânica quântica. Apresentar os conceitos fundamentais relacionados à quantização de energia, níveis de energia e transições eletrônicas. Demonstrar como a teoria quântica é utilizada para explicar a estrutura de átomos e suas propriedades. Dar início ao uso de ferramentas computacionais para resolução de problemas numéricos e algébricos.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Compreender a utilização da mecânica quântica para descrever o comportamento de partículas elementares. Saber interpretar a função de onda e a equação de Schrödinger, bem como, seus resultados. Ter a habilidade que o capacite a compreender as aplicações da mecânica quântica e sua interpretação para sistemas simples. Entender os conceitos fundamentais relacionados às configurações eletrônicas e átomos multieletrônicos. Saber usar ferramentas computacionais para resolução de problemas numéricos e algébricos.

EMENTA / PROGRAMA

Quantização da energia (radiação do corpo negro, efeito fotoelétrico, átomo de Bohr); fundamentos da mecânica quântica (postulados e noções de operadores), função de onda e sua interpretação; equação de Schrödinger e sua interpretação, aplicação da mecânica quântica (partícula livre, partícula na caixa, oscilador harmônico); átomo de hidrogênio (aspectos gerais das soluções radial e angular); configurações eletrônicas e átomos multieletrônicos.

METODOLOGIA

Aulas expositivas e de exercícios.

AVALIAÇÃO :

Realização de exercícios, provas escritas e seminários.

BIBLIOGRAFIA

1. ATKINS P. W., PAULA J., *Físico-Química*, Vol. 2, 7ª ed., Ed. LTC: Rio de Janeiro, 2002.