

DEPARTAMENTO: Engenharia Mecânica**DISCIPLINA:** Tópicos Especiais: Introdução a Espectroscopia Atômica e Molecular**SIGLA:** EAM**CARGA HORÁRIA TOTAL:** 30**TEORIA:** 15**PRÁTICA:** 15**CÓDIGO:** 246**CURSO:** Programa de Pós-graduação em Ciência e Engenharia de Materiais – PGCEM / Mestrado e Doutorado**SEMESTRE/ANO:** 01/2012**PRÉ-REQUISITOS:****PROFESSOR RESPONSÁVEL:** Professor Dr. Luiz Veriano O.Dalla Valentina / Professor Dr. Ricardo A. De S. Zanon / Professor Dr. Carlos Eduardo Fellows – IF/UFF**E M E N T A**

- Revisão de mecânica quântica; átomo de hidrogênio; átomos de muitos elétrons; moléculas diatômicas; moléculas poliatômicas

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO**I – Revisão de Mecânica Quântica**

- I.a – postulados da Mecânica Quântica;
- I.b – Teoria de Perturbação;

II – Átomo de Hidrogênio

- II.a – Solução da Equação de Schrödinger em potencial esférico;
- II.b – Espectro de um átomo de Hidrogênio. Regras de seleção;

III – átomos de vários elétrons

- III.a – Aproximação de campo central;
- III.b – Configuração eletrônica dos átomos;
- III.c – Momento angular;
- III.d – magnetismo orbital e de spin;
- III.e – funções e coordenadas de spin. Spin-orbitais;
- III.f – princípio de Pauli;
- III.g – Funções de onda relativa a dois elétrons;
- III.h – Espectro Óptico dos alcalinos;
- III.i – Níveis de átomos de vários elétrons externos. Acoplamento de Russel-Sanders. Regras de HUND;

IV – Íon molecular de H₂⁺

- IV.a – Aproximação de Born-Oppenheimer. Vibrações de uma molécula diatômica ;
- IV.b – Orbitais moleculares. Simetria;
- IV.c – Aproximação L.C.A.O;

V – Molécula de Hidrogênio

- V.a – Método de Heitler London;
- V.b – Método dos orbitais moleculares;
- V.c – Busca de uma solução exata em um problema de dois elétrons. Correlação dos movimentos eletrônicos. A molécula de Hidrogênio;

VI – Moléculas Diatômicas

- VI.a – Método dos orbitais moleculares e campo auto-consistente;
- VI.b – Orbitais moleculares: N₂, O₂ e F₂;
- VI.c – Moléculas diatômicas heteronucleares;
- VI.d – teorema do Virial e a natureza das ligações químicas;

VII – Moléculas Poliatômicas

- VII.a – Vibração de moléculas poliatômicas;
- VII.b – Rotação de moléculas poliatômicas;
- VII.c – Simetrias em moléculas poliatômicas;
- VII.d – Estrutura eletrônica de moléculas poliatômicas;

VIII – Instrumentação para espectroscopia óptica

- VIII.a – Confecção e síntese de espectros atômicos;
- VIII.b - Confecção e síntese de espectros moleculares.

BIBLIOGRAFIA

- ALEM SOBRINHO, P. e CLAUDIO., *Resíduos sólidos, perigosos: solidificação de lamas tóxicas com cimentos*. Anais EPUSP, São Paulo, 1998, Série A, p. 7-23.
- ALMEIDA CAMARGO, N.H., MAMANI GILAPA L.C., *Caracterização de um resíduo sólido a base de carbonato de cálcio para produção de um material biocerâmico*. 13 CBECIMAT, Curitiba 1998, CD-ROM, p. 4779-4787
- ALMEIDA CAMARGO, N.H., MAMANI GILAPA L.C., *Estudo de resíduo sólido industrial a base de carbonato de cálcio para produção de um biocerâmicos*. IV CIDIM, 23 – 26 de Novembro, Santiago, Chile, 1999.
- AMRIPTHALE, S.S. e PATEL, M., *Utilization of red mud, fly ash in manufacturing bricks with pyrophyllite*. silicates Industriels, Paris, 1987, no 3, p. 31-35.
- BARTH, E. D. e al., *Stabilization and solidification of hazardous wastes. Pollution technology review*. Ed. Noyes Data Corporation, 1990, no 186, p. 203.
- BERARD, J. e ROUX, R., Viabilité des bétons du Québec: les rôles des granulats. *Canadian Journal of Civil Engineering*, 1986, Vol. 12, p. 12-24.
- CABRERA, J.G. e WOOLLEY, G.R., Fly ash utilization in civil engineering. In *Environmental Aspects of Constructions with waste Materials*. Ed. Elsevier, 1994, p. 345-356.