



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

1º Semestre 2022

Disciplina	
Código	Nome
QF530	Introdução à Química Quântica e Espectroscopia Molecular

Turmas	Horário	Local
A	Seg: 10/12 Qua: 10/12	IQ03 IQ03

Docentes

Diego Pereira dos Santos, e-mail: santosdp@unicamp.br; Sala: I-112

Disciplinas do 1S/2022

A condução das disciplinas do 1S/2022 está normatizada pela **GR 74/2021** que estabelece em seu **Art. 1º** - As aulas teóricas e práticas do 1º semestre de 2022 serão presenciais, sendo que as aulas teóricas deverão ser realizadas com até 100% da lotação estabelecida da sala de aula, caso não haja restrições sanitárias e no **§1º do Art. 1º**. - As condições sanitárias serão orientadas pelo Comitê Científico de Contingência do Coronavírus da Unicamp previamente ao começo do semestre.

Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações

Descrição: A disciplina conta com aulas teóricas que serão ministradas às segundas e quartas-feiras das 10:00 às 12:00. A avaliação do desempenho individual dos alunos será feita através de duas provas ao longo do semestre, de acordo com o calendário especificado a seguir.

Prazos de Entrega das Atividades e dos Resultados das Avaliações

Descrição: As provas terão duração de 2 horas. Informações subsequentes à avaliação serão disponibilizadas em até 7 dias após a realização da mesma. O exame também terá duração de 2 horas.

Critérios de Avaliação e Aprovação

Descrição detalhada do método para o cálculo da média parcial e da nota final (que combine a média parcial e nota do exame)

O aproveitamento dos alunos será computado em termos das médias aritméticas das provas:

$$MF=(P1+P2)/2$$

Caso $MF < 5$, será necessária a realização de exame. Neste caso a nova média final (MF2) será calculada considerando a nota de exame (NE):

$$MF2=(MF+NE)/2$$

A aprovação na disciplina está condicionada a média final (MF ou MF2) maior ou igual a 5.

Forma de Atendimento Extra-Classe

Descrição: A disciplina contará com a colaboração de PEDs. Os horários de atendimento extra-classe com os PEDs e/ou com o docente serão definidos junto com os alunos no primeiro dia de aula. Além disso, será disponibilizada a possibilidade dos alunos apresentarem suas dúvidas na página da disciplina (google classroom), as quais serão respondidas pelos professores.

Calendário

Data	Atividade
14/03	Início das aulas do 1º período letivo de 2022
14 a 16/04	Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
21 a 23/04	Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
11/05	Prova 1
24/05	Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula
01/06	Reunião SBQ – Não haverá aula
16 a 18/06	Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
09/07	Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
13/07	Prova 2
18 a 23/07	Semana de Estudos
25/07	Exame

Outras informações relevantes

- (1) Art. 56 do Regimento Geral de Graduação: São condições para aprovação: II - nas disciplinas em que nota e frequência são adotadas como forma de avaliação – obter **nota final** igual ou superior a 5,0 (cinco vírgula zero) e a frequência mínima estabelecida para a disciplina no Catálogo dos Cursos de Graduação; a frequência mínima de 75%.
- (2) **Sobre o Abono de Faltas:** os critérios do Abono de Faltas são definidos pelo artigo 72, do Regimento Geral de Graduação.
- (3) Quaisquer alterações no PDE, propostas pelo(a) Docente ou Discentes, no transcorrer do semestre, só poderão ser realizadas mediante a concordância do(a) Docente e Discentes, e autorização da Comissão de Graduação.

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA



PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS

Disciplina	
Código	Nome
QF530	Introdução à Química Quântica e Espectroscopia Molecular

Vetor
OF:S-5 T:004 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:004 SL:004 C:004 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req
F 328 *MA311

Ementa
Noções de Espectroscopia e Postulados da mecânica quântica. Partícula na caixa e estrutura eletrônica. Rotor rígido e espectroscopia rotacional de moléculas diatômicas. Oscilador harmônico e espectroscopia vibracional de moléculas diatômicas. Espectroscopia roto-vibracional de moléculas diatômicas. Estrutura eletrônica, estados fundamentais e excitados. Fotoquímica e fotofísica.

Programa
<ol style="list-style-type: none">Noções de Espectroscopia e Postulados da mecânica quântica. Interação da radiação com a matéria: absorção, emissão, espalhamento e difração. Coeficientes de Einstein, noções sobre laser, momento de transição e regras de seleção, radiação do corpo negro e ondas de Broglie. Postulados da mecânica quântica: funções de onda bem-comportadas, operadores e cálculo de propriedades, equação de Schrödinger dependente do tempo e independente do tempo. Aplicações no modelo da partícula na caixa e relação com espectroscopia eletrônica.Espectroscopia Roto-Vibracional. Espectroscopia rotacional na região de microondas e noções sobre instrumentação. Modelo do rotor rígido, espectros de moléculas diatômicas e regras de seleção. Espectroscopia na região do infravermelho e noções sobre instrumentação. Modelo do oscilador harmônico e anarmônico. Análise de espectro roto-vibracional de moléculas diatômicas e regras de seleção. Espectroscopia Raman e regras de seleção.Estrutura Eletrônica. Instrumentação de espectroscopia UV-vis. O átomo de hidrogênio. Espectros de emissão e absorção eletrônicas e regras de seleção. Noção sobre o efeito Stark e Zeeman. Operador hamiltoniano para sistemas multieletrônicos. Spin, princípio de exclusão de Pauli e determinantes de Slater. Moléculas e a aproximação de Born-Oppenheimer. Noção sobre o método Hartree-Fock. Princípio variacional e combinação linear de orbitais atômicos. Aplicação em moléculas. O método de Hückel e sistemas pi. Espectroscopia de absorção e emissão UV-visível. Noções sobre fotoquímica e fotofísica.

Bibliografia
<ol style="list-style-type: none">D.A.McQuarrie and J.D.Simon, Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books; 1a. edição (1997).Oswaldo Sala, Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho; Ed.Unesp, 1ª. Edição (1996).G. N. Barrow, Introduction to Molecular Spectroscopy; McGraw-Hill Education, (1962).

Critérios de Avaliação

Critérios de avaliação definidos pelo Professor, com base no disposto na Seção I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliação do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduação. Frequência: 75 % (* O abono de faltas será considerado dentro do previsto no capítulo VI, seção X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduação)