



2º Semestre 2022

Disciplina	
Código	Nome
QF530	Introdução à Química Quântica e Espectroscopia Molecular

Turmas	Horário	Local
A	Seg: 21/23	IQ04
	Qua: 19/21	IQ04

**Docentes**

Pedro A M Vazquez - [vazquez@unicamp.br](mailto:vazquez@unicamp.br) - Sala H320

**Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações**

Descrição: A disciplina será conduzida mediante aulas expositivas do conteúdo estimulando a participação dos alunos. Após a discussão dos conceitos principais serão apresentados exemplos realizados exercícios para a melhor fixação. A avaliação será feita através de 3 provas conforme calendário anexo.

**Prazos de Entrega das Atividades e dos Resultados das Avaliações**

Os resultados das avaliações/atividades serão disponibilizados em até 3 semanas após sua conclusão.

**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)

Para aprovação no curso é necessário ter frequência de 75% das aulas.

O aproveitamento do aluno será calculado pela média aritmética (M) das 3 provas (P1, P2, P3):

$$M = (P1 + P2 + P3)/3$$

Os alunos que obtiverem  $M \geq 5,0$  serão considerados aprovados

Os alunos que obtiverem  $M \leq 2,5$  estarão reprovados

Os alunos com  $5 > M > 2,5$  realizarão o exame final, neste caso, a nota final NF do estudante será a média aritmética entre a média das provas (M) e a nota do exame (E):

$$NF = (M + E)/2$$

Os alunos com  $NF \geq 5,0$  serão considerados aprovados

**Forma de Atendimento Extra-Classe**

A disciplina contará com a colaboração de um PED. Os horários de atendimento extraclasses com os PED e/ou com o docente serão definidos junto com os alunos na primeira semana de aula. Além disso, será utilizado o Google Classroom para os alunos publicarem dúvidas no mural do curso as quais serão respondidas pelo professor e/ PED

Calendário	
Data	Atividade
15/08	Início das Aulas
22-27/08	Semana da Química - Não haverá aulas
07/09	Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
28/09	P1 - Primeira Prova
12/10	Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
26/10	P2 - Segunda Prova
02/11	Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
14-15/11	Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
30/11	P3 - Terceira Prova
8 a 14/12	Semana de Estudos
21/12	Exame Final

#### 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) De acordo com a **Deliberação CG 2022/01** sobre **PROVA SUBSTITUTIVA EM CASO DE FALTA JUSTIFICADA POR COVID-19**, a CG estabelece que o exame final poderá substituir a avaliação no dia de faltas abonadas pelo inciso V do artigo 72, exceto se o(a) estudante comprovar que a ausência foi motivada por suspeita ou contágio por COVID-19. Nessas situações – suspeita ou contágio comprovado por COVID-19 – o(a) estudante terá direito a reposição da atividade avaliativa, desde que componha sua média final, em data a ser combinada com o docente responsável, não podendo a prova de exame final ser utilizada para fins de substituição.

(4) 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



Disciplina	
Código	Nome
QF530	Introdução à Química Quântica e Espectroscopia Molecular

<b>Vetor</b> 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%
---

<b>Pré-Req</b> F 328 *MA311
-----------------------------

<b>Ementa</b> 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.
--

<b>Programa</b> <ol style="list-style-type: none"><li><b>Noções de Espectroscopia e Postulados da mecânica quântica.</b> 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.</li><li><b>Espectroscopia Roto-Vibracional.</b> 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.</li><li><b>Estrutura Eletrônica.</b> 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.</li></ol>
--

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

<b>Crêterios de Avaliaçãõ</b> Crêterios de avaliaçãõ definidos pelo Professor, com base no disposto na Seçãõ I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliaçãõ do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduaçãõ. Frequênciã: 75 % (* O abono de faltas serã considerado dentro do previsto no capítulo VI, seçãõ X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduaçãõ)
---