



1º Semestre - 2023

Disciplina	
Código	Nome
QF530	Introdução à Química Quântica e à Espectroscopia Molecular

Turmas	Horário	Local
A	Seg. 10-12 / Qua. 10-12	IQ06

Docentes
Leandro Martínez - lmartine@unicamp.br - Sala H312

Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações
Descrição: A disciplina será ministrada na forma de aulas expositivas, contará com duas avaliações presenciais, mais o exame de recuperação, e uma lista de exercícios que também fará parte do critério de avaliação.

Prazos de Entrega das Atividades e dos Resultados das Avaliações
Descrição: As provas serão presenciais e devem ser entregues no dia da avaliação. A lista de exercícios deve ser entregue até a data da segunda prova. Os resultados das provas serão apresentados na aula seguinte de cada avaliação.

Forma de Condução das Avaliações e Prazos de Entrega
A disciplina conta com dois tipos de avaliação: provas presenciais, que serão realizadas em sala de aula, em dias especificados, e uma lista de exercícios, que deverá ser entregue na data da última prova. O resultado das provas é devolvido à turma na aula seguinte daquela que foi feita a prova. No dia da entrega dos resultados é feita uma correção e discussão com os alunos, e os alunos podem solicitar revisão da prova caso tenham detectado alguma inconsistência na correção. Solicitações de revisão em outros momentos não são aceitas, exceto em casos excepcionais. A nota da lista de exercícios será divulgada até uma semana depois da data da segunda prova.

Critérios de Avaliação e Aprovação

A disciplina contará com duas provas, de igual peso, e uma lista de exercícios, além do Exame. A lista de exercícios deve ser entregue no final do curso (até a data da segunda prova) e receberá uma nota de 0 a 10, da seguinte forma: para cada exercício em branco ou mal feito, a nota da lista diminui 0,5 ponto.

A nota da disciplina é calculada da seguinte forma: A média aritmética das provas é chamada de NP. A nota da lista é NL. A nota da disciplina é calculada por $ND = NP * (NL/10)$, ou seja, multiplicando a nota das provas pela nota da lista. Ou seja, se o aluno tem nota 10 na lista, a nota final é igual a NP.

Se ND for maior ou igual a 5,0, o aluno está aprovado com nota final ND. Se ND for menor que 5,0, o aluno poderá fazer exame, que terá nota NE, e a nota final, NF, será a média aritmética de ND e NE. Se NF for maior ou igual a 5,0, o aluno estará aprovado. Se NF for menor que 5,0, o aluno estará reprovado.

Calendário – Disciplinas Teórica

(incluir a data de todas as atividades avaliativas, inclusive exame)

06/03 - Apresentação da disciplina / Aula

08/03, 13/03, 15/03, 20/03, 22/03, 27/03, 29/03: Aulas

03/04, 05/04, 10/04, 12/04, 17/04, 19/04, 24/04,

26/04: Prova 1

01/05 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

03/05: Entrega Prova 1 - Revisão

08/05, 10/05, 15/05, 17/05, 22/05: Aulas

24/05: Avaliação de curso (não tem aula)

29/05, 31/05: Aulas

05/06, 07/06, 12/06, 14/06, 19/06, 21/06,

26/06: Prova 2

28/06: Entrega Prova 2 - Revisão

03 a 08/07 - Semana de Estudos

12/07: Exame

Outras informações relevantes

Notas, exercícios e informações adicionais: <http://m3g.iqm.unicamp.br>, no link “Material Didático”.

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA

Código: QF530								
Nome: Introdução à Química Quântica e Espectroscopia Molecular								
Nome em Inglês: Introduction to Quantum Chemistry and Molecular Spectroscopy								
Nome em Espanhol: Introducción a la Química Cuántica y Espectroscopia Molecular								
Tipo de Disciplina: Semanal								
Tipo de Aprovação: Nota e Frequência								
Característica: Regular								
Frequência: 75%								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: Semestral / Todos os períodos								
Exige Exame: Sim								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
4	-	-	-	-	-	4	15	4
Ocorrência nos Currículos: 05, 50, 56								
Pré-requisitos: *MA311								
<p>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 fundamental e excitados. Fotoquímica e fotofísica.</p>								
<p>Programa:</p> <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 Básica

- 1) MCQUARRIE, D. A.; SIMON, J. D. **Physical Chemistry: A Molecular Approach**. 1. Ed. Sausalito: University Science Books, 1997. 1360 p
- 2) BARROW, G. M. **Introduction to Molecular Spectroscopy**. 1. Ed. Tóquio: McGraw-Hill. 1962. 318 p
- 3) LEVINE, I. **Físico-Química**. 6. Ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2012. 2v 1008p

Bibliografia Complementar

- 1) SALA O., **Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho**. 2. Ed. São Paulo: Editora Unesp, 2011. 280 p
- 2) PAULING, L.; WILSON, E. B. **Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry**. 1. Ed. New York: McGraw-Hill, 1935. 468 p
- 3) HERZBERG, G. **Molecular spectra and molecular structure Volume I - Spectra of Diatomic Molecules**. 2. Ed. Malabar: Krieger Publishing. 1989. 660p
- 4) PAVIA, D.; LAMPMAN, G.; KRIZ, G.; VYVYAN, J. **Introdução à espectroscopia**. 2. Ed. São Paulo: Cengage Learning. 2015. 733p
- 5) ATKINS, P. W.; DE PAULA, J. **Físico-Química: fundamentos**. 9. Ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos. 2012. 2v. 948p