



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre 2022

Disciplina	
Código	Nome
QF530	Introdução à Química Quântica e Espectroscopia Molecular

Turmas	Horário	Local
A	Ter: 21:00-23:00	PB15
	Qua: 19:00-21:00	PB14

Docentes
Pedro A M Vazquez - vazquez@unicamp.br - Sala H320

Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações
A disciplina será conduzida mediante aulas expositivas do conteúdo estimulando a participação dos alunos. Após a discussão dos conceitos principais serão apresentados exemplos e realizados exercícios para a melhor fixação. A avaliação será feita através de 3 provas escritas nas datas do 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 extraclasse com o PED e/ou com o docente serão definidos junto com os alunos nas primeiras semanas 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/ou PED

Calendário	
Data	Atividade
31/07	Início das Aulas do 2º Período Letivo
01/08	Início das aulas de QF530
21-25/08	Semana da Química - Não haverá aulas
06/09	P1 - Primeira Prova
11/10	P2 - Segunda Prova
17/10	Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula
15/11	Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
22/11	P3 - Terceira Prova
04 a 09/12	Semana de Estudos
13/12	Exame Final

Outras informações relevantes
<p>(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%.</p> <p>(2) Sobre o Abono de Faltas: os critérios do Abono de Faltas são definidos pelo artigo 72, do Regimento Geral de Graduação.</p> <p>(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.</p> <p>(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.</p>

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA



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).
--

Crêterios de Avaliaçãõ 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)
