



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

1º Semestre 2024

Disciplina	
Código	Nome
QF530	Introdução à Química Quântica e Espectroscopia Molecular

Turmas	Horário	Local
A	Segunda-feira, 10h às 12h	IQ01
A	Quarta-feira, 10h às 12h	IQ01

Docentes
Rogério Custodio, rogerct@unicamp.br , sala H-318

Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações
<p>Descrição:</p> <p>O conteúdo da disciplina será dividido em três partes, essencialmente seguindo o programa formal. A primeira parte está relacionada com a introdução aos conceitos de espectroscopia, os postulados da mecânica quântica e aplicações em sistemas simples, tais como: partícula na caixa 1D, 2D, 3D e partícula no anel.</p> <p>Na segunda parte será explorado o modelo do rotor rígido e sua aplicação na espectroscopia rotacional com apresentação dos elementos experimentais desta espectroscopia. Neste mesmo bloco será apresentado o modelo clássico do oscilador harmônico, o modelo do oscilador quântico, os contrastes entre os dois modelos e sua aplicação na espectroscopia roto-vibracional. Elementos experimentais da espectroscopia vibracional e Raman serão apresentados. Os modelos mencionados serão associados com a interpretação de espectros rotacionais e vibracionais de moléculas simples.</p> <p>A terceira parte da disciplina se concentrará na estrutura eletrônica de átomos e moléculas em termos de elementos experimentais de emissão e absorção e sua interpretação quântica na ausência e presença de campos elétricos e magnéticos. O conteúdo teórico procurará ampliar a interpretação da estrutura eletrônica do átomo de hidrogênio até sistemas com elétrons pi.</p> <p>Todo material apresentado (slides, exercícios, programa da disciplina e outros dados) será disponibilizado no Google Classroom.</p> <p>O conteúdo ministrado estará associado com informações e tecnologias atuais e compatíveis com os conceitos ministrados.</p>

Prazos de Entrega das Atividades e dos Resultados das Avaliações
<p>Descrição:</p> <p>As únicas atividades que fazem parte da avaliação da disciplina são as 3 provas mencionadas no Critério de Avaliação. Durante o semestre serão distribuídas listas de exercícios para que os alunos pratiquem o uso dos conceitos fundamentais em problemas elementares apresentados em aulas. Estes exercícios não serão considerados no processo de avaliação. São simplesmente elementos de orientação de estudo dirigido.</p>

Critérios de Avaliação e Aprovação

Serão ministradas três (3) provas com pesos 1 para a primeira prova (P1) e 2 para a segunda (P2) e terceira (P3) provas. A média M das três provas será dada por: $M = (P1 + 2.P2 + 2.P3)/5$. Média maior ou igual a cinco (5) o aluno está aprovado. Média menor do que cinco (5) o aluno fará exame. A média final (MF), considerando exame, será a média simples entre a média das provas e a nota do exame (Ex), ou seja: $MF = (M + Ex)/2$. Média final maior ou igual a cinco (5) o aluno está aprovado.

Será dada prova substitutiva nos casos previstos no regimento. Esta prova será ministrada no final do semestre e o conteúdo abordará toda a matéria. A nota do próprio exame será considerada como nota de prova substitutiva.

Forma de Atendimento Extra-Classe

Descrição:

Disponibilidade de atendimento em qualquer horário por e-mail ou agendamento de horário para esclarecimentos presencial ou online através do Google Classroom. Não há restrição de horário de atendimento, exceto em caso em que houver sobreposição de horário com outras atividades de caráter institucional do docente. Em resumo, possibilidade de atendimento em quase qualquer horário ou dia da semana.

Calendário	
Data	Atividade
28/02	Apresentação da disciplina
04/03	Aula
06/03	Aula
11/03	Aula
13/03	Aula
18/03	Aula
20/03	Aula
25/03	Aula
27/03	Aula
01/04	Aula
03/04	1ª Prova
08/04	Aula
10/04	Aula
15/04	Aula
17/04	Aula
22/04	Aula
24/04	Aula
29/04	Aula
06/05	Aula
08/05	Aula
13/05	Aula
15/05	2ª Prova
20/05	Aula
22/05	Aula
27/05	Aula
29/05	Aula
03/06	Aula
05/06	Aula
10/06	Aula

12/06	Aula
17/06	Aula
19/06	Aula
24/06	Aula
26/06	3ª Prova
10/07	Exame
<p>10 a 14/02 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 28 a 30/03 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 01/05 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 21/05 - Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula 30 e 31/05 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 01/06 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 01 a 06/07 - Semana de Estudos 08 e 09/07 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 10 a 16/07 - Semana de Exames</p>	

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

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								
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.								
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 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