



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

1º Semestre 2021

Disciplina	
Código	Nome
QF530	Introdução à química quântica e espectroscopia molecular

Turmas	Horário	Local
A	Seg: 10/12	Remota (classroom)
	Qua: 10/12	Remota (classroom)

**Docentes**

Diego Pereira dos Santos, santosdp@unicamp.br, Sala I-112 (lab. I-113)

**Disciplinas Teóricas – Plano de Ação IQ 1S/2021**

As disciplinas teóricas do 1S/2021, em virtude da pandemia de COVID-19 e da necessidade de manutenção de distanciamento social, serão conduzidas integralmente de forma remota e mediada por tecnologia, **incluindo os processos avaliativos**. Qualquer alteração na forma de condução da disciplina será informada com a devida antecedência.

**Forma de Condução das Aulas Remotas Mediadas por Tecnologia**

- Aulas online síncronas (ao vivo)  
 Aulas Gravadas  
 Aulas online ao vivo + disponibilização da gravação da aula

Descrição:

**Forma de Atendimento às Dúvidas das Aulas Remotas**

Descrição: Todas as segundas-feiras, entre 10 e 11 hrs, serão realizados atendimentos às dúvidas das aulas gravadas. Este atendimento será feito através da plataforma google meet. Além disso, será disponibilizado no classroom uma área para manifestação de dúvidas que serão respondidas pelo docente e PED.

**Plataforma Virtual que se pretende utilizar**

- Google Classroom + Google Meet  
 Moodle

Outra (especificar):

**Forma de Condução das Avaliações e Prazos de Entrega**

Descrição: A disciplina conta com duas provas (P1 e P2) que serão disponibilizadas via classroom e terão prazo de devolução de 48 horas na mesma plataforma.

**Critérios de Avaliação e Aprovação**





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"><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>

Bibliografia
<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>

**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)