



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre - 2020

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

Turmas	Horário	Local
A	Seg. 19-21 / Qua. 21-23	Condução Remota

Docentes

Leandro Martínez - lmartine@unicamp.br - Sala H312

Disciplinas Teóricas – Plano de Ação IQ 2S/2020

As disciplinas teóricas do 2S/2020, 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.**

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: Pretende-se gravar o curso inteiro na forma de aulas teóricas, que serão transmitidas aos alunos nos horários das aulas, com acompanhamento do docente para comentários, dúvidas, etc.

Forma de Atendimento às Dúvidas das Aulas Remotas

Descrição: O docente estará disponível para tirar dúvidas online no horário das aulas e, se for necessário, em horários adicionais mediante requisição por parte dos estudantes.

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 contará com duas provas online, que deverão ser feitas no horário da aula, no GoogleClassroom. Ainda, contará com uma lista de exercícios que deverá ser entregue feita à mão (escaneada, se for o caso, ou fisicamente, se possível). A nota da disciplina será a média aritmética das duas provas (cada uma valendo entre 0 e 10), multiplicada pela nota da lista. A nota da lista variará entre 0 e 1, sendo que o aluno perde 0,1 ponto para cada exercício que não foi entregue. A lista deve ser entregue integralmente no dia da realização da segunda avaliação. Finalmente, a disciplina contará com um exame

de recuperação final.

O exame poderá ser usado como prova substitutiva de uma das provas caso o aluno apresenta uma justificativa válida para o não comparecimento. Se o aluno faltar nas duas provas, uma das notas será zero.

Critérios de Avaliação e Aprovação

Descrição: Alunos com média final (média aritmética das notas das provas multiplicada pela nota da lista) maior ou igual a 5,0 serão aprovados. Alunos com média menor que 5,0 deverão fazer o exame final. A nota final da disciplina será a média aritmética da nota média final e da nota do exame. Alunos com nota final maior ou igual a 5,0 serão aprovados, e aqueles com nota final menor que 5,0 serão reprovados.

Calendário – Disciplinas Teórica

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

16/09 - Início das aulas

09/11 - Prova 1

13/01 - Prova 2 (Data final para entrega da lista de exercícios)

25/01 - Exame final

12/10 – Não haverá atividades

21 a 23/10 – Congresso de Iniciação Científica (no período em que estiver sendo realizado o congresso os alunos que participarem do evento estarão dispensados das aulas.)

28/10 – Não haverá atividades

02/11 – Não haverá atividades

23 a 27/11 – Semana da Química Virtual – Não haverá aula, sendo considerado dia letivo.

25/11 – Reunião de Avaliação de Curso

07 e 08/12 – Não haverá atividades

24 a 31/12 – Não haverá atividades (recesso).

19/01 – Término das Aulas do 2S/2020

20 a 26/01 – Semana de Exames Finais do 2S/2020

Outras informações relevantes

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

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

- 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

- 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).

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)