



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre - 2021

Disciplina	
Código	Nome
QF530	Introdução à Química Quântica Espectroscopia Molecular

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

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
<input checked="" type="checkbox"/> Aulas online síncronas (ao vivo) <input checked="" type="checkbox"/> Aulas Gravadas <input checked="" type="checkbox"/> Aulas online ao vivo + disponibilização da gravação da aula
Descrição: O curso inteiro foi gravado na forma de aulas teóricas, que estão disponíveis online. As aulas ao vivo, nos horários previstos, serão usadas para discutir os tópicos das aulas teóricas e tirar dúvidas.

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
<input checked="" type="checkbox"/> Google Classroom + Google Meet <input type="checkbox"/> Moodle
Outra (especificar): Youtube

Forma de Condução das Avaliações e Prazos de Entrega
Descrição: 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 (media 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)

Agosto:

09 a 14: Semana da Química – Não haverá aula.

16 - Início das aulas

18, 23, 25, 30 - Aulas

Setembro:

06 e 07 - Não haverá atividades

1, 8, 13, 15, 20, 22, 27, 29 - Aulas

Outubro:

11 e 12/10 - Não haverá atividades

29 e 30/10 - Não haverá atividades

4 - Prova 1

6, 13, 18, 20, 25, 27 - Aulas

Novembro:

01 e 02/11 - Não haverá atividades

15/11 - Não haverá atividades

3, 8, 10, 17, 22, 24, 29 - Aulas

Dezembro:

6 - Prova 2

09 a 14/12 - Semana de Estudos

15 - Exame

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 <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).
--