



2º Semestre - 2019

Disciplina	
Código	Nome
QF530	Introdução à Química Quântica e Espectroscopia Molecular

Turmas	Horário	Local
A	Seg: 21/23	IQ04
A	Qua: 19/21	IQ04

Docentes

Diego Pereira dos Santos, santosdp@unicamp.br, Sala I-112

CrITÉrios de Avaliação e AprovaçãO

Avaliação

A avaliação será realizada através de 4 ítems:

-Testes individuais: testes rápidos realizados em sala de aula individualmente. (Média das notas: MT_i)

-Testes em grupo: testes rápidos realizados em sala de aula em grupos definidos no primeiro dia de aula. (Média das notas: MT_g)

- Prova 1 (Nota: P_1)

- Prova 2 (Nota: P_2)

Os testes (em grupos ou individuais) serão realizados semanalmente às segundas-feiras às 21 hrs e têm duração de aproximadamente 15 min.

O conteúdo de cada teste será baseado nas aulas da semana anterior.

A média final (MF_1) será calculada como:

$$MF_1 = \frac{MT_i + MT_g + P_1 + P_2}{4}$$

Se $MF_1 \geq 5,0 \Leftrightarrow$ aprovação.

Se $MF_1 < 5,0$; neste caso será necessária a realização de exame (Nota: E) e a média final (MF_2) será calculada como:

$$MF_2 = \frac{MF_1 + E}{2}$$

Calendário

As aulas da disciplina QF530 ocorrerão às segundas (21-23 hrs) e quartas (19-21 hrs) a partir do dia 12/08/2019 na sala IQ04 do Instituto de Química exceto nos dias de feriado (28/10 e 20/11) e nos dias 02/12 e

04/12 (semana de exames).

Os testes (em grupos ou individuais) serão realizados **semanalmente** às **segundas-feiras** às 21 hrs e têm duração de aproximadamente 15 min. A prova P1 será realizada no dia 30/09 e a prova P2 será realizada no dia 25/11/18.

O exame será realizado no dia 09/12 .

Outras informações relevantes

Exemplo: recomendações para trabalho em laboratório, informações sobre avaliações substitutivas, caso sejam previstas, indicações de atividades extra-sala (importante quando a disciplina contém vetor O), etc.

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA



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">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).

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)