



**PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA**

**2º Semestre 2024**

<b>Disciplina</b>	
<b>Código</b>	<b>Nome</b>
QF530	Introdução à Química Quântica e Espectroscopia Molecular

<b>Turmas</b>	<b>Horário</b>	<b>Local</b>
A	3ª-feira 21:00-23:00	PB-16
	4ª-feira 19:00-21:00	PB-13

<b>Docentes</b>
Pedro A. M. Vazquez, Sala H320, vazquez@unicamp.br

<b>Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações</b>
A disciplina será conduzida mediante aulas expositivas presenciais do conteúdo estimulando a participação dos alunos. Após a discussão dos conceitos principais serão apresentados exemplos e realizados exercícios para a melhor fixação. A avaliação será feita através de 3 provas escritas nas datas do calendário anexo.

<b>Prazos de Entrega das Atividades e dos Resultados das Avaliações</b>
Os resultados das avaliações/atividades serão disponibilizados até 3 semanas após sua realização.

<b>Critérios de Avaliação e Aprovação</b>
Descrição detalhada do método para o cálculo da média parcial e da nota final (que combine a média parcial e nota do exame)
Para aprovação no curso é necessário ter frequência de 75% das aulas. O aproveitamento do aluno será calculado pela média aritmética (M) das 3 provas (P1, P2, P3): $M = (P1 + P2 + P3)/3$ Os alunos que obtiverem $M \geq 5,0$ serão considerados aprovados Os alunos que obtiverem $M \leq 2,5$ estarão reprovados Os alunos com $5 > M > 2,5$ realizarão o exame final, neste caso, a nota final NF do estudante será a média aritmética entre a média das provas (M) e a nota do exame (E): $NF = (M + E)/2$ Os alunos com $NF \geq 5,0$ serão considerados aprovados
<b>Forma de Atendimento Extra-Classe</b>
A disciplina contará com a colaboração de um PED. Os horários de atendimento extraclasse com o PED e/ou com o docente serão definidos junto com os alunos nas primeiras semanas de aula. Além disso, será utilizado o Google Classroom para os alunos publicarem dúvidas no mural do curso as quais serão respondidas pelo professor e/ou PED

<b>Calendário</b>
-------------------

Data	Atividade
06/08	Apresentação do Curso
20-21/08	Semana da Química, não haverá aula
11/09	P1 – Primeira Prova
15/10	Avaliação de Curso, não haverá aula
22/10	P2 – Segunda Prova
20/11	Feriado, não haverá aula
27/11	P3 – Terceira Prova
02-07/12	Semana de Estudos
10/12	Exame Final
<p>19 a 23/08 - Semana da Química - não haverá aula para as disciplinas dos cursos 05/50.  07/09 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades  12/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades  15/10 - Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula  28/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades  02/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades  15 e 16/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades  20/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades  02 a 07/12 - Semana de Estudos  09 a 14/12 - 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, O PROGRAMA E A BIBLIOGRAFIA

Código: <b>QF530</b>								
Nome: <b>Introdução à Química Quântica e Espectroscopia Molecular</b>								
Nome em Inglês: <b>Introduction to Quantum Chemistry and Molecular Spectroscopy</b>								
Nome em Espanhol: <b>Introducción a la Química Cuántica y Espectroscopia Molecular</b>								
Tipo de Disciplina: <b>Semanal</b>								
Tipo de Aprovação: <b>Nota e Frequência</b>								
Característica: <b>Regular</b>								
Frequência: <b>75%</b>								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: <b>Semestral / Todos os períodos</b>								
Exige Exame: <b>Sim</b>								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
<b>4</b>	-	-	-	-	-	<b>4</b>	<b>15</b>	<b>4</b>
Ocorrência nos Currículos: <b>05, 50, 56</b>								
Pré-requisitos: <b>*MA311</b>								
Ementa: <b>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.</b>								
Programa:								
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. <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>2. <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>3. <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 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