



1º Semestre 2025

Disciplina	
Código	Nome
QF530	Introdução à Química Quântica e Espectroscopia Molecular

Turmas	Horário	Local
A	Seg: 10/12	IQ01
A	Qua: 10/12	IQ01

Docentes

Nelson Henrique Morgon, nhmorgon@unicamp.br, Sala-H315 (IQ/UNICAMP).

Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações

Descrição: A disciplina será ministrada na forma de aulas expositivas, contará com duas avaliações presenciais, mais o exame de recuperação. Teremos 4 listas de exercícios que também farão parte do critério de avaliação. Elas serão disponibilizadas no ambiente do Classroom ao final de cada mês.

Prazos de Entrega das Atividades e dos Resultados das Avaliações

Descrição: As provas serão presenciais. Os resultados da 1ª Prova serão apresentados em até 15 dias após sua realização, e em até 5 dias após a 2ª Prova. O prazo de entrega das Listas de Exercícios será uma semana a partir de suas disponibilizações no ambiente do Classroom.

Critérios de Avaliação e Aprovação

Descrição detalhada do método para o cálculo da média parcial e da nota final (que combine a média parcial e nota do exame)

2 Avaliações (P1 e P2) e caso o estudante apresente justificativa para ausência nas avaliações regulares, uma Prova Substitutiva (PS). E mais 4 listas de exercícios.

Média das Provas = $(P1 + P2)/2$. Se a Média das Provas for maior ou igual a 5 (cinco), aluno(a) está aprovado(a). Se a Média das Provas for menor do que 5 (cinco), aluno(a) está de Exame.

No caso do Exame, a Média será: Média Final = $(MP + NE)/2$, onde MP é a Média das Provas e NE a nota do Exame. Se a Média Final for maior ou igual a 5 (cinco), aluno(a) aprovado(a). Se a Média Final for menor do que 5 (cinco), aluno(a) reprovado(a).

As notas das Listas de Exercícios serão acrescidas às notas das provas em até 2 pontos para cada prova.

A nota da Prova Substitutiva será a nota do Exame, e este poderá também ser utilizado como tal, havendo necessidade.

Forma de Atendimento Extra-Classe

Descrição: O docente está disponível em sua sala (H-315) durante o expediente, no entanto recomenda-se que o estudante entre em contato via e-mail para agendamento.

Calendário

Data	Atividade
24/02	Apresentação da Disciplina/PDE
26/02	Aula 01 - Introdução

03/03	Aula 02 - Parte 1 (Noções de Espectroscopia e Postulados da MQ)
05/03	Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
10/03	Aula 03 - Parte 1 (Noções de Espectroscopia e Postulados da MQ)
12/03	Aula 04 - Parte 1 (Noções de Espectroscopia e Postulados da MQ)
17/03	Aula 05 - Parte 1 (Noções de Espectroscopia e Postulados da MQ)
19/03	Aula 06 - Parte 1 (Noções de Espectroscopia e Postulados da MQ)
24/03	Aula 07 - Parte 1 (Noções de Espectroscopia e Postulados da MQ)
26/03	Aula 08 - Parte 1 (Noções de Espectroscopia e Postulados da MQ)
31/03	Aula 09 - Parte 1 (Noções de Espectroscopia e Postulados da MQ)
02/04	Aula 10 - Parte 2 (Espectroscopia Roto-Vibracional)
07/04	Aula 11 - Parte 2 (Espectroscopia Roto-Vibracional)
09/04	Aula 12 - Parte 2 (Espectroscopia Roto-Vibracional)
14/04	Aula 13 - Parte 2 (Espectroscopia Roto-Vibracional)
16/04	Aula 14 - Parte 2 (Espectroscopia Roto-Vibracional)
21/04	Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
23/04	Aula 15 - Parte 2 (Espectroscopia Roto-Vibracional)
28/04	1a. Prova
30/04	Discussão da 1a. Prova
05/05	Aula 16 - Parte 3 (Estrutura Eletrônica)
07/05	Aula 17 - Parte 3 (Estrutura Eletrônica)
12/05	Aula 18 - Parte 3 (Estrutura Eletrônica)
14/05	Aula 19 - Parte 3 (Estrutura Eletrônica)
19/05	Aula 20 - Parte 3 (Estrutura Eletrônica)
21/05	Aula 21 - Parte 3 (Estrutura Eletrônica)
26/05	Aula 22 - Parte 3 (Estrutura Eletrônica)
28/05	Aula 23 - Parte 3 (Estrutura Eletrônica)
02/06	Aula 24 - Parte 3 (Estrutura Eletrônica)
04/06	Aula 25 - Parte 3 (Estrutura Eletrônica)
09/06	Aula 26 - Parte 3 (Estrutura Eletrônica)
11/06	Aula 27 - Parte 3 (Estrutura Eletrônica)
16/06	Aula 28 - Parte 3 (Estrutura Eletrônica)
18/06	Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
23/06	Aula 29 - Parte 3 (Estrutura Eletrônica)
25/06	2a. Prova
30/06	Discussão da 2a. Prova
02/07	Semana de Estudos
09/07	Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
14/07	Exame
Art. 58 do Regimento Geral de Graduação: O Exame deverá ser realizado no período previsto pelo Calendário Escolar e deverá estar agendado para o mesmo dia da semana e horário em que são ministradas as aulas da disciplina, exceto na ocorrência de feriado ou ponto facultativo.	
24/02 - Início das aulas do 1º período letivo de 2025 01 a 05/03 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 17 a 21/04 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 01 a 03/05 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 20/05 - Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula 19 a 21/06 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 07 a 12/07 - Semana de Estudos 09/07 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 14 a 19/07 - Semana de Exames	

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) 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, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA

Código: QF530								
Nome: Introdução à Química Quântica e Espectroscopia Molecular								
Nome em Inglês: Introduction to Quantum Chemistry and Molecular Spectroscopy								
Nome em Espanhol: Introducción a la Química Cuántica y Espectroscopia Molecular								
Tipo de Disciplina: Semanal								
Tipo de Aprovação: Nota e Frequência								
Característica: Regular								
Frequência: 75%								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: Semestral / Todos os períodos								
Exige Exame: Sim								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
4	-	-	-	-	-	4	15	4
Ocorrência nos Currículos: 05, 50, 56								
Pré-requisitos: *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 fundamental 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 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