

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS INSTITUTO DE QUÍMICA





$1^{\underline{O}}$ Semestre - 2019

Disciplina			
Código	Nome		
QF637	Introdução à Espectroscopia e à Termodinâmica Estatística		

Turm	as Horário	Local
Α	Seg: 16-18; Qua: 8-10	IQ03

Disponível em https://www.iqm.unicamp.br/gradua%C3%A7%C3%A3o

Docentes

Leandro Martínez - leandro@iqm.unicamp.br - Sala H312

Critérios de Avaliação e Aprovação

A disciplina contará com duas provas, cada uma correspondente a um dos tópicos: Espectroscopia ou Termodinâmica Estatística. Para ser aprovado sem a realização do EXAME, o aluno deve ter nota maior ou igual a 3,0 em ambas as provas, e média aritmética de provas maior ou igual a 5,0.

Em caso de aprovação direta, a média de avaliações do aluno será a média aritmética das provas.

Caso o aluno tenha que fazer exame em função das notas das provas, a média de avaliações será a média aritmética da nota do exame com a média aritmética das notas das provas.

O Exame abarcará todo o conteúdo da disciplina, mesmo que o aluno tenha obtido nota maior que 5,0 em um dos tópicos.

Por fim, a disciplina conta com uma lista de exercícios para cada tópico. As listas devem ser feitas a mão e entregues, e receberão uma nota de 0 a 10, em função da quantidade de exercícios feitos. Para cada 2 exercícios que não foram feitos com cuidado, a nota cai 1 ponto.

A nota final da disciplina será calculada pela média geométrica da nota da lista com a média de avaliações. Se a nota final for maior ou igual a 5,0, o aluno será aprovado. Se for menor que 5,0, o aluno será reprovado.

As provas serão entregues corrigidas, e sua resolução será discutida nos dias reservados no cronograma, exclusivamente.

Notas, exercícios e informações adicionais: http://leandro.iqm.unicamp.br, no link "Material Didático".

Calendário

Cronograma					
Mês	Dia	Atividade			
Fevereiro	27	Apresentação/Aula			
Março	4,6	Feriado			
iviaiço	11,13,18,20,25,27	Aulas			
Abril	1,3,8,10,15,17,22,24,29	Aulas			
	1	Feriado			
	6	Prova 1			
Maio	8	Correção da Prova 1 / Aula			
IVIAIO	13,15,20	Aulas			
	22	Não haverá aula.			
	27,29	Aulas			
	3,5,10,12,17,19,24,26	Aulas			
Junho	24	Prova 2			
	26	Correção da Prova 2			
Julho	1 - 6	Semana de Estudos			
Julio	8	Exame			

Outras informações relevantes

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS INSTITUTO DE QUÍMICA



PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS

Disciplina				
Código	Nome			
QF637	Introdução à Espectroscopia e à Termodinâmica Estatística			

Vetor

OF:S-1 T:004 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:004 SL:004 C:004 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req	QF536 *F 428
---------	--------------

Ementa

Espectroscopia molecular. Espectroscopia de ressonância paramagnética de elétrons (ERP) e magnética nuclear (RMN). Lasers. Fotoquímica. Ensembles e postulados. Funções de partição e termodinâmica. Sistemas de partículas independentes: distinguíveis e indistinguíveis.

Programa

I. Introdução à Espectroscopia

- 1. Revisão de mecânica quântica: Postulados da mecânica quântica e equação de Schroedinger; Estados quânticos da partícula na caixa, átomo de H, osciladores harmônico e anarmônico, rotor rígido; Momentos angulares orbitais e magnéticos; spins.
- 2. Teoria de perturbação dependente do tempo (probabilidade de transição; momento de transição)
- 3. O espectro eletromagnético e interação da radiação com a matéria.
- 4. Espectroscopia rotacional
- 5. Espectroscopia rotovibracional (infravermelho e Raman)
- 6. Espectroscopia eletrônica (transições vibrônicas)
- 7. Lasers
- 8. Ressonância magnética nuclear e eletrônica
- 9. Fotoquímica e fotofísica
- 10. Espectros estacionários e espectroscopia resolvida no tempo

II. Introdução à Termodinâmica Estatística

- 1. Revisão de termodinâmica: 1a, 2a e 3a leis
- 2. Macroestados, microestados e configurações
- 3. Contagem de estados e entropia: Distribuição de Boltzmann;
- 4. Funções de partição e ensembles
- 5. Sistemas de Partículas Independentes
- 6. Gases ideais; Gases ideais poliatômicos
- 7. Equilíbrio químico: Uma visão microscópica detalhada

Bibliografia

- 1- Physical Chemistry: A Molecular Approach", D. A. McQuarrie e J. D. Simon.
- 2- Molecular Thermodynamics, D. A. McQuarrie e J. D. Simon. Scientific Books.
- 3- Statistical Mechanics, D. A. McQuarrie.
- 4- Physical Chemistry, R. A. Alberty & R. J. Silbey
- 5- Physical Chemistry, I. Levine.

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)