

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS**  
**EDITAL**  
**CARGO DE PROFESSOR DOUTOR – MS-3.1**

O Diretor do Instituto de Química da Universidade Estadual de Campinas, através da Secretaria Geral, torna pública a abertura de inscrições para o concurso público de provas e títulos, para provimento de 01 (um) cargo de Professor Doutor, nível MS-3.1, em RTP, com opção preferencial para o RDIDP, nos termos do item 2, na área de Espectroscopia Molecular, nas disciplinas QF-536 - Química Quântica e QF-636 - Introdução à Espectroscopia e à Termodinâmica, do Departamento de Físico-Química do Instituto de Química da Universidade Estadual de Campinas.

**1. DO REQUISITO MÍNIMO PARA INSCRIÇÃO**

1.1. Poderá se inscrever no concurso o candidato que, no mínimo, seja portador do Título de Doutor.

1.2. É desejável que o candidato tenha o seguinte perfil:

1.2.1. Possua experiência em Química Quântica e/ou Espectroscopia Molecular; seja portador do título de Doutor em Química na área de Físico-Química; possua produção científica independente (caracterizada pela publicação de artigos científicos em revistas indexadas), capacidade de liderança em grupos de pesquisa (caracterizada pela aprovação de projetos de pesquisa e captação de recursos junto às agências de fomento) e capacidade de formação de recursos humanos (caracterizado pela orientação de alunos ao nível de pós-graduação). É desejável também que o candidato possua experiência no exterior bem como experiência didática.

1.2.2. A inscrição de candidato que deixar de atender ao perfil desejável não será indeferida por este motivo.

**2. DO REGIME DE TRABALHO**

2.1. Nos termos do artigo 109 do Estatuto da UNICAMP, o Regime de Dedicção Integral à Docência e à Pesquisa (RDIDP) é o regime preferencial do corpo docente e tem por finalidade estimular e favorecer a realização da pesquisa nas diferentes áreas do saber e do conhecimento, assim como, correlatamente, contribuir para a eficiência do ensino e para a difusão de ideias e conhecimento para a comunidade.

2.2. Ao se inscrever no presente concurso público o candidato fica ciente e concorda que, no caso de admissão, poderá ser solicitada, a critério da Congregação da Unidade, a apresentação de plano de pesquisa, que será submetido à Comissão Permanente de Dedicção Integral à Docência e à Pesquisa – CPDI – para avaliação de possível ingresso no Regime de Dedicção Integral à Docência e à Pesquisa – RDIDP.

2.3. O Regime de Dedicção Integral à Docência e à Pesquisa (RDIDP) está regulamentado pela Deliberação CONSU-A-02/01, cujo texto integral está disponível no sítio:

[http://www.pg.unicamp.br/mostra\\_norma.php?consolidada=S&id\\_norma=2684](http://www.pg.unicamp.br/mostra_norma.php?consolidada=S&id_norma=2684).

2.4. O aposentado na carreira docente aprovado no concurso público somente poderá ser admitido no Regime de Turno Parcial (RTP), vedada a extensão ao Regime de Dedicção Integral à Docência e à Pesquisa (RDIDP), conforme Deliberação CONSU-A-08/2010.

2.5. A remuneração inicial para o cargo de Professor Doutor, MS-3.1, da Carreira do Magistério Superior é a seguinte:

- a) RTP – R\$ 1.675,01
- b) RTC – R\$ 4.251,87
- c) RDIDP – R\$ 9.663,20

**3. DAS INSCRIÇÕES**

3.1. As inscrições deverão ser feitas de forma presencial pelo candidato ou por seu procurador (procuração simples) nos dias úteis compreendidos dentro do prazo de 20 (vinte) dias úteis, a contar do primeiro dia útil subsequente ao da publicação deste edital no Diário Oficial do Estado – DOE –, no horário das 9h00 às 11h30 e das 14h00 às 17h00, no Instituto de Química – Universidade Estadual de Campinas, situada na Cidade Universitária "Zeferino Vaz", Barão Geraldo.

Endereço: Rua Josué de Castro s/nº, Bloco D, sala 350 – Cidade Universitária “Zeferino Vaz”, Barão Geraldo, Campinas, SP. CEP 13083-970.

3.1.1. Não serão admitidas inscrições enviadas via postal, via fac-símile ou correio eletrônico, nem inscrições condicionais ou apresentadas fora do prazo estabelecido.

3.2. No momento da inscrição deverá ser apresentado requerimento dirigido ao Diretor do Instituto de Química, contendo nome, domicílio e profissão, acompanhado dos seguintes documentos:

a) prova de que é portador do título de doutor de validade nacional. Para fins de inscrição, o candidato poderá apresentar apenas a Ata da defesa de sua Tese de Doutorado, ou documento oficial equivalente, sendo que a comprovação do título de Doutor será exigida por ocasião da admissão. O candidato que tenha obtido o título de Doutor no exterior, caso aprovado, deverá obter, durante o período probatório, o reconhecimento do referido título para fins de validade nacional, sob pena de demissão;

b) documento de identificação pessoal, em cópia;

c) sete exemplares de memorial, com o relato das atividades realizadas e a comprovação dos trabalhos publicados e demais informações, que permitam avaliação dos méritos do candidato, a saber:

c.1. títulos universitários;

c.2. curriculum vitae et studiorum;

c.3. atividades científicas, didáticas e profissionais;

c.4. títulos honoríficos;

c.5. bolsas de estudo em nível de pós-graduação;

c.6. cursos frequentados, congressos, simpósios e seminários dos quais participou.

d) um exemplar ou cópia de cada trabalho ou documento mencionado no memorial;

e) sete cópias do plano de trabalho detalhado, incluindo descrição das atividades de pesquisa, ensino e extensão a serem executadas pelo candidato.

3.2.1. O memorial poderá ser aditado, instruído ou completado até a data fixada para o encerramento das inscrições.

3.2.2. O candidato portador de necessidades especiais, temporária ou permanente, que precisar de condições especiais para se submeter às provas deverá solicitá-las por escrito no momento da inscrição, indicando as adaptações de que necessita.

3.2.3. No ato da inscrição o candidato poderá manifestar por escrito a intenção de realizar as provas na língua inglesa. Os conteúdos das provas realizadas nas línguas inglesa e portuguesa serão os mesmos.

3.3. Recebida a documentação e satisfeitas as condições do edital, a Secretaria da Unidade encaminhará o requerimento de inscrição com toda a documentação ao Diretor do Instituto de Química, que a submeterá ao Departamento ou a outra instância competente, definida pela Congregação da Unidade a que estiver afeta a área em concurso, tendo este o prazo de 15 dias para emitir parecer circunstanciado sobre o assunto

3.3.1. O parecer de que trata o subitem anterior será submetido à aprovação da Congregação da Unidade, instância que deliberará sobre o deferimento de inscrições.

3.3.2. A Unidade divulgará no sítio [www.iqm.unicamp.br/node/5832](http://www.iqm.unicamp.br/node/5832) a deliberação da Congregação referente às inscrições e composição da Comissão Julgadora.

3.4. Os candidatos que tiveram os requerimentos de inscrição deferidos serão notificados a respeito da composição da Comissão Julgadora e seus suplentes, bem como do calendário fixado para as provas e do local de sua realização, por meio de edital a ser publicado no Diário Oficial do Estado e divulgado no sítio [www.iqm.unicamp.br/node/5832](http://www.iqm.unicamp.br/node/5832), com antecedência mínima de 20 (vinte) dias úteis do início das provas.

3.5. O prazo de inscrição poderá ser prorrogado, a critério da Unidade, por igual período, devendo ser publicado no Diário Oficial do Estado até o dia do encerramento das inscrições.

3.6. A critério da Unidade, o prazo de inscrições poderá ser reaberto, por igual período, até o final do dia útil imediatamente posterior ao do encerramento das inscrições.

#### **4. DA COMISSÃO JULGADORA**

4.1. A Comissão Julgadora será constituída de 05 (cinco) membros titulares e 02 (dois) suplentes, portadores, no mínimo, do Título de Doutor, cujos nomes serão aprovados pela Congregação da Unidade, e sua composição deverá observar os princípios constitucionais, em particular o da impessoalidade.

4.1.1. Pelo menos dois membros da Comissão Julgadora deverão ser externos à Unidade ou pertencer a outras instituições.

4.2. Caberá à Comissão Julgadora examinar os títulos apresentados, conduzir as provas do concurso e proceder às arguições a fim de fundamentar parecer circunstanciado, classificando os candidatos.

4.3. A Comissão Julgadora será presidida pelo membro da Unidade com a maior titulação. Na hipótese de mais de um membro se encontrar nesta situação, a presidência caberá ao docente mais antigo na titulação.

## **5. DAS PROVAS**

5.1. O concurso constará das seguintes provas

- a) prova escrita (peso 0,6);
- b) prova específica (peso 0,4);
- c) prova de títulos (peso 1);
- d) prova de arguição (peso 1);
- e) prova didática (peso 1);

5.2. Na definição dos horários de realização das provas será considerado o horário oficial de Brasília/DF.

5.2.1. O candidato deverá comparecer ao local designado para a realização das provas com antecedência mínima de 30 (trinta) minutos da hora fixada para o seu início.

5.2.2. Não será admitido o ingresso de candidato no local de realização das provas após o horário fixado para o seu início.

5.3. O não comparecimento às provas, por qualquer que seja o motivo, caracterizará desistência do candidato e resultará em sua eliminação do certame.

5.4. Havendo provas de caráter eliminatório, estas devem ocorrer no início do concurso e seus resultados divulgados antes da sequência das demais provas.

5.4.1. Participarão das demais provas apenas os candidatos aprovados nas provas eliminatórias.

### **Prova escrita**

5.5. A prova escrita versará sobre assunto de ordem geral e doutrinária, relativa ao conteúdo do programa das disciplinas ou conjunto de disciplinas em concurso.

5.5.1. No início da prova escrita, a Comissão Julgadora fará a leitura da(s) questão(ões). Em seguida, a prova escrita terá início, com duração de 04 (quatro) horas para a redação da(s) resposta(s), não sendo permitida qualquer forma de consulta.

5.5.2. Cada examinador atribuirá uma nota de 0 (zero) a 10 (dez) à prova escrita.

### **Prova específica**

5.6. A prova específica será constituída de:

- a) avaliação, mediante arguição oral, do plano de trabalho do candidato, acompanhado de parecer circunstanciado dos membros da Comissão Julgadora;
- b) o candidato terá, no máximo, 20 (vinte) minutos para exposição oral de seu Plano de Trabalho;
- c) a avaliação mediante arguição oral do Plano de Trabalho terá a duração de 01 (uma) hora por candidato.

5.6.1. Cada examinador atribuirá uma nota de 0 (zero) a 10 (dez) à prova específica.

### **Prova de títulos**

5.7. Na prova de títulos a Comissão Julgadora apreciará o memorial elaborado e comprovado pelo candidato no ato da inscrição.

5.7.1. Os membros da Comissão Julgadora terão o prazo máximo de 24 (vinte e quatro) horas para emitir o julgamento da prova de títulos.

5.7.2. Cada examinador atribuirá uma nota de 0 (zero) a 10 (dez) à prova de títulos.

### **Prova de arguição**

5.8. Na prova de arguição o candidato será interpelado pela Comissão Julgadora sobre a matéria do programa da disciplina ou conjunto de disciplinas em concurso e/ou sobre o memorial apresentado na inscrição.

5.8.1. Na prova de arguição cada integrante da Comissão Julgadora disporá de até 30 (trinta) minutos para arguir o candidato que terá igual tempo para responder às questões formuladas.

5.8.2. Havendo acordo mútuo, a arguição poderá ser feita sob a forma de diálogo, respeitando, porém, o limite máximo de 01 (uma) hora para cada arguição.

5.8.3. Ao final da prova, cada examinador atribuirá ao candidato nota de 0 (zero) a 10 (dez).

### **Prova didática**

5.9. A prova didática versará sobre o programa de disciplina ou conjunto de disciplinas em concurso (Anexo I) e nela o candidato deverá revelar cultura aprofundada no assunto.

5.9.1. A matéria para a prova didática será sorteada com 24 (vinte e quatro) horas de antecedência, de uma lista de 10 (dez) pontos, organizada pela Comissão Julgadora.

5.9.2. A prova didática terá duração de 50 (cinquenta) a 60 (sessenta) minutos, e nela o candidato desenvolverá o assunto do ponto sorteado, vedada a simples leitura do texto da aula, mas facultando-se, com prévia aprovação da Comissão Julgadora, o emprego de roteiros, apontamentos, tabelas, gráficos, diapositivos ou outros recursos pedagógicos utilizáveis na exposição.

5.9.3. Ao final da prova, cada examinador atribuirá ao candidato nota de 0 (zero) a 10 (dez).

5.10. As provas orais do presente concurso público serão realizadas em sessão pública. É vedado aos candidatos assistir às provas dos demais candidatos.

5.11. A Comissão Julgadora poderá ou não descontar pontos quando o candidato não atingir o tempo mínimo ou exceder o tempo máximo pré-determinado para as provas didática e de arguição.

## **6. DA AVALIAÇÃO E JULGAMENTO DAS PROVAS**

6.1. As provas de títulos, arguição, didática, terão apenas caráter classificatório.

6.1.1. A média ponderada das notas atribuídas às provas escrita e específica terá caráter eliminatório, independentemente do número de candidatos que compareçam para a participação do concurso

6.1.1.1. Deve-se observar o seguinte procedimento:

a) ao final da prova escrita cada examinador atribuirá ao candidato uma nota de 0 (zero) a 10 (dez), considerando o previsto no item 5.5. deste edital;

b) ao final da prova específica cada examinador atribuirá ao candidato uma nota de 0 (zero) a 10 (dez), considerando o previsto no item 5.6. deste edital;

c) a média ponderada das provas escrita e específica será calculada conforme os pesos descritos no item 5.1. deste edital;

d) após a atribuição das notas, os resultados de ambas as provas escrita e específica serão proclamados pela Comissão Julgadora em uma única sessão pública, antes do início das provas de títulos, didática e de arguição;

e) serão considerados aprovados os candidatos que obtiverem a média ponderada das duas provas (escrita e específica) igual ou superior a 07 (sete), de, no mínimo, 03 (três) dos 05 (cinco) examinadores

f) somente participarão das demais provas do concurso público os candidatos aprovados, considerando a média ponderada das provas escrita e específica;

g) as notas atribuídas na prova escrita e específica por cada um dos examinadores aos candidatos aprovados serão computadas ao final do concurso público para fins de classificação, nos termos do item 6.3. deste edital.

6.2. Ao final de cada uma das provas previstas no subitem 5.1. deste edital, cada examinador atribuirá ao candidato uma nota de 0 (zero) a 10 (dez).

- 6.2.1. As notas de cada prova serão atribuídas individualmente pelos integrantes da Comissão Julgadora em envelope lacrado e rubricado, após a realização de cada prova e abertos ao final de todas as provas do concurso em sessão pública.
- 6.3. A nota final de cada examinador será a média ponderada das notas atribuídas por ele ao candidato em cada prova.
- 6.3.1. Cada examinador fará uma lista ordenada dos candidatos pela sequência decrescente das notas finais. O próprio examinador decidirá os casos de empate, com critérios que considerar pertinentes.
- 6.3.2. As notas finais serão calculadas até a casa dos centésimos, desprezando-se o algarismo de ordem centesimal, se inferior a cinco e aumentando-se o algarismo da casa decimal para o número subsequente, se o algarismo da ordem centesimal for igual ou superior a cinco.
- 6.4. A Comissão Julgadora, em sessão reservada, depois de divulgadas as notas e apurados os resultados, emitirá parecer circunstanciado sobre o resultado do concurso justificando a indicação feita, do qual deverá constar tabela e/ou textos contendo as notas, as médias e a classificação dos candidatos. Também deverão constar do relatório os critérios de julgamento adotados para avaliação de cada uma das provas. Todos os documentos e anotações feitas pela Comissão Julgadora para atribuição das notas deverão ser anexados ao processo do concurso público.
- 6.4.1. Ao relatório da Comissão Julgadora poderão ser acrescentados relatórios individuais de seus membros.
- 6.5. O resultado do concurso será imediatamente proclamado pela Comissão Julgadora em sessão pública.
- 6.5.1. Serão considerados habilitados os candidatos que obtiverem, da maioria dos examinadores, nota final mínima sete.
- 6.5.2. A relação dos candidatos habilitados é feita a partir das listas ordenadas de cada examinador.
- 6.5.3. O primeiro colocado será o candidato que obtiver o maior número de indicações em primeiro lugar na lista ordenada de cada examinador.
- 6.5.4. O empate nas indicações será decidido pela Comissão Julgadora, prevalecendo sucessivamente a maior média obtida na prova didática e a maior média obtida na prova de títulos. Persistindo o empate a decisão caberá, por votação, à Comissão Julgadora. O Presidente terá voto de desempate, se couber.
- 6.5.5. Excluindo das listas dos examinadores o nome do candidato anteriormente selecionado, o próximo classificado será o candidato que obtiver o maior número de indicações na posição mais alta da lista ordenada de cada examinador.
- 6.5.6. Procedimento idêntico será efetivado subsequentemente até a classificação do último candidato habilitado.
- 6.6. As sessões de que tratam os itens 6.2.1 e 6.5 deverão se realizar no mesmo dia em horários previamente divulgados.
- 6.7. O parecer da Comissão Julgadora será submetido à Congregação do Instituto de Química, que só poderá rejeitá-lo em virtude de vícios de ordem formal, pelo voto de 2/3 (dois terços) de seus membros presentes.
- 6.8. O resultado final do concurso será submetido à apreciação da Câmara Interna de Desenvolvimento de Docentes (CIDD), e encaminhada à Câmara de Ensino, Pesquisa e Extensão (CEPE) para deliberação.
- 6.9. A relação dos candidatos aprovados será publicada no Diário Oficial do Estado, com as respectivas classificações.

## **7. DA ELIMINAÇÃO**

- 7.1. Será eliminado do concurso público o candidato que:
- a) Deixar de atender às convocações da Comissão Julgadora;
  - b) Não comparecer ao sorteio do ponto da prova didática;
  - c) Não comparecer a qualquer uma das provas, exceto a prova de títulos.

## **8. DO RECURSO**

8.1. O candidato poderá interpor recurso contra o resultado do concurso, exclusivamente de nulidade, ao Conselho Universitário, no prazo de 05 (cinco) dias úteis, a contar da publicação prevista no item 6.9 deste edital.

8.1.1. O recurso deverá ser protocolado na Secretaria Geral da UNICAMP.

8.1.2. Não será aceito recurso via postal, via fac-símile ou correio eletrônico.

8.1.3. Recursos extemporâneos não serão recebidos.

8.2. O resultado do recurso será divulgado no sítio eletrônico da Secretaria Geral da UNICAMP ([www.sg.unicamp.br](http://www.sg.unicamp.br))

## **9. DAS DISPOSIÇÕES FINAIS**

9.1. A inscrição do candidato implicará o conhecimento e a tácita aceitação das normas e condições estabelecidas neste Edital, em relação às quais o candidato não poderá alegar qualquer espécie de desconhecimento.

9.2. As convocações, avisos e resultados do concurso serão publicados no Diário Oficial do Estado e estarão disponíveis no sítio [www.iqm.unicamp.br/node/5832](http://www.iqm.unicamp.br/node/5832), sendo de responsabilidade exclusiva do candidato o seu acompanhamento.

9.3. Se os prazos de inscrição e/ou recurso terminarem em dia em que não há expediente na Universidade, no sábado, domingo ou feriado, estes ficarão automaticamente prorrogados até o primeiro dia útil subsequente.

9.4. O prazo de validade do concurso será de 01ano, a contar da data de publicação no Diário Oficial do Estado da homologação dos resultados pela CEPE, podendo ser prorrogado uma vez, por igual período.

9.4.1. Durante o prazo de validade do concurso poderão ser providos os cargos que vierem a vagar, para aproveitamento de candidatos aprovados na disciplina ou conjunto de disciplinas em concurso.

9.5. À critério da Unidade de Ensino e Pesquisa, ao candidato aprovado e admitido poderão ser atribuídas outras disciplinas além das referidas na área do concurso, desde que referentes à área do concurso ou de sua área de atuação.

9.6. O candidato aprovado e admitido somente será considerado estável após o cumprimento do estágio probatório, referente a um período de 03 (três) anos de efetivo exercício, durante o qual será submetido à avaliação especial de desempenho, conforme regulamentação prevista pela Universidade.

9.7. Até 60 (sessenta) dias após a publicação da homologação do concurso o candidato poderá solicitar a retirada dos memoriais (item 3.2. "c" e "d") entregues no ato da inscrição e que não foram utilizados pela Comissão Julgadora, mediante requerimento protocolado na Secretaria da(o) Faculdade/Instituto. Após este prazo, se não retirados, os memoriais serão descartados.

9.8. O presente concurso obedecerá às disposições contidas na Deliberação CONSU-A-30/13, e Resolução Interna da Congregação do Instituto de Química nº 055/2014, que estabelece os requisitos e procedimentos internos do Instituto de Química para a realização dos concursos.

9.8.1. Cópia da Deliberação CONSU-A-30/13 poderá ser obtida no sítio [www.sg.unicamp.br](http://www.sg.unicamp.br) ou junto à Secretaria do Departamento de Físico-Química do Instituto de Química, que poderá prestar quaisquer outras informações relacionadas ao concurso público.

9.9. Os itens deste edital poderão sofrer eventuais alterações, atualizações ou acréscimos enquanto não consumada a providência ou evento que lhes disser respeito, até a data de convocação para a prova correspondente, circunstância que será mencionada em Edital ou Aviso a ser publicado.

9.10. Qualquer alteração nas regras de execução do concurso deverá ser objeto de novo Edital.

## **Anexo I – Programas das Disciplinas**

### **QF536 QUÍMICA QUÂNTICA**

Ementa: Postulados da Mecânica Quântica. Equação de Schroedinger. Soluções exatas e métodos de aproximação. Átomo de Hidrogênio e átomos multieletrônicos. Métodos de estruturas eletrônicas para sistemas moleculares.

Programa:

Aspectos Históricos. Propriedades de ondas: Comprimento de onda, número de onda; período, frequência, velocidade de propagação, amplitude. Equações fundamentais da antiga teoria quântica: Planck e De Broglie.

I. Primeiro Postulado da Mecânica Quântica: Funções de Onda: Função de onda genérica estacionária e dependente do tempo. Densidade de probabilidade e probabilidade. Funções de onda normalizadas e não-normalizadas. Funções de onda bem comportadas: contínuas, unívocas e finitas.

II. Segundo Postulado da Mecânica Quântica: Operadores. Operador de momento linear. Criando operadores a partir de conceitos clássicos: operador de energia potencial, cinética e hamiltoniano. Soma e multiplicação de operadores. Operadores lineares. Equação de autovalores. Operadores hermitianos e funções ortogonais.

III. Alguns Teoremas Fundamentais. Ortogonalidade. Conjunto de Autofunções Ortonormais (Delta de Kronecker). Expansão numa base. Comutação. Princípio da Incerteza de Heisenberg. Comutação de dois operadores em um conjunto de autofunções. - Ortogonalidade. Comutadores e princípio da incerteza.

IV. Terceiro postulado: Teorema do Valor Médio. Valores médios e probabilidade para valores discretos e contínuos. Autovalores e valores médios.

V. Quarto Postulado: Equação de Schrödinger. Equação de Schrödinger dependente do tempo. Separação de variáveis. Equação de Schrödinger independente do tempo. Solução da equação diferencial dependente apenas do tempo. A função de onda global dependente do tempo.

VI. Solução analítica da partícula na caixa unidimensional (1D). Reconhecendo o potencial. Construindo o hamiltoniano e a equação de Schrödinger. Solução analítica da equação diferencial: O uso de condições de contorno. Níveis de energia, função de onda: normalização e nós. Valor médio do operador de momento. Valor médio do operador posição: valor médio e valor mais provável.

VII. Solução analítica da partícula na caixa bidimensional (2D). Construindo o hamiltoniano e a equação de Schrödinger. Separação de Variáveis. Degenerescência. Cálculo do valor médio para mais de uma coordenada.

VIII. Solução analítica da partícula no anel. Movimento circular no plano xy, construção do operador de energia cinética: momento de inércia e momento angular. Sistema de coordenadas plano polar e transformação de coordenadas cartesianas (xy) e plano polares ( $r, \theta$ ). Solução da Eq. de Schrödinger e condições de contorno: quantização de energia, degenerescência, associação dos números quânticos com momento angular no eixo z.

IX. Rotor Rígido. Rotor rígido com duas massas, centro de massa para dois corpos, mudanças da origem do sistema de coordenadas, representação da energia cinética de rotação em três dimensões: massa reduzida, momento de inércia e momento angular. Momento angular e construção do operador de momento angular em coordenadas cartesianas. Coordenadas esféricas polares e transformação de coordenadas do operador momento angular. Solução da equação de Schrödinger para o rotor rígido, separação de variáveis e quantização de energia. Funções de onda do rotor rígido: Funções associadas de Legendre e os harmônicos esféricos. Associação dos números quânticos com momento angular.

X. Oscilador Harmônico. Solução clássica do oscilador harmônico: frequência fundamental e constante de força. Solução da equação de Schrödinger para o oscilador harmônico envolvendo duas massas: A equação diferencial de Hermite e a quantização de energia.

XI. Princípio Variacional e Teoria de Perturbação.

XII. Átomo de H e Multieletrônicos.

XIII. Modelo de Hartree. Definição de spin-orbitais e função de onda como produto de Hartree utilizando spin-orbitais. Determinação do valor médio de energia eletrônica de um átomo multieletrônico empregando o produto de Hartree. Integração sobre as coordenadas de spin e o valor médio da energia em termos de funções orbitais. Uma dedução simplificada do método de Hartree: modelo de partículas independentes, funções spin-orbitais ortonormais, integrais de Coulomb e as equações de Hartree. Interpretação das equações de Hartree: modelo de campo médio e autoconsistente. Distribuições de férmions e bósons: simetria e anti-simetria da função de onda. Funções de onda para o átomo de He no estado fundamental e excitados.

- XIV. Método e Hartree-Fock. Funções de Onda Anti-simétricas para muitos elétrons. Determinantes de Slater. Princípio de exclusão de Pauli.  
XV. Teoria do Orbital Molecular.

### **QF636 INTRODUÇÃO À ESPECTROSCOPIA E À TERMODINÂMICA**

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

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
8. Teoria do Estado de Transição
9. Sólidos cristalinos ideais (modelo de Einstein)
10. Outros desdobramentos: Mec. estatística quântica; mec. estatística clássica com modelos contínuos (visando gases reais e líquidos)

Campinas, 09 de janeiro de 2015.