



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre 2022

Disciplina	
Código	Nome
QG664	Espectroscopia Molecular

Turmas	Horário	Local
A	Quarta feira das 8:00H às 10:00H	IQ-04
A	Quarta feira das 10:00 às 12:00	LQ-08

**Docentes**

Fernando Aparecido Sigoli [fsigoli@unicamp.br](mailto:fsigoli@unicamp.br)  
René Alfonso Nome Silva [nome@unicamp.br](mailto:nome@unicamp.br)

**Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações**

As aulas teóricas e discussão de experimentos serão realizadas presencialmente em sala de aula. As aulas experimentais serão realizadas nos laboratórios de ensino (LQ-08) ou nos laboratórios de pesquisa multiusuários do IQ UNICAMP, conforme a necessidade de equipamentos específicos

**Prazos de Entrega das Atividades e dos Resultados das Avaliações**

A disciplina contará com duas provas, P1 e P2, e trabalhos associados aos experimentos (T) a serem realizados. As provas serão realizadas em sala de aula com duração de 2h e, os relatórios dos trabalhos experimentais deverão ser entregues impreterivelmente no início da aula seguinte.

**CrITÉrios de Avaliação e Aprovação**

O aproveitamento dos alunos será computado em termos das médias aritméticas das provas ( $M_p$ ) e dos trabalhos ( $M_T$ ). A média final ( $M$ ) será calculada através de:

$$M=0,7M_p+0,3M_T$$

Haverá aprovação se  $M$  for maior ou igual a 5, com as seguintes condições:

Caso  $M < 5$  ou  $M_p < 3$  ou  $M_T < 5$ , será necessária a realização de exame.

Neste caso a nova média final ( $M_F$ ) será calculada considerando a nota de exame ( $N_E$ ):

$$M_F=(M+N_E)/2$$

Com a realização de exame, a aprovação na disciplina está condicionada a média final  $M_F$  maior ou igual a 5.

$$M_F \geq 5$$

**Forma de Atendimento Extra-Classe**

Os alunos serão atendidos pelos docentes em horário e dia agendados no primeiro dia de aula.

**Calendário**

Data	Atividade
17/08	<b>Apresentação da disciplina</b> Experimento 1: Revisão de Conceitos fundamentais em espectroscopia
24/08	<b>SEMANA DA QUÍMICA</b>
31/08	Experimento 2: Espectroscopia Rotovibracional
14/09	Experimento 3: Espectroscopia eletrônica de absorção
21/09	Experimento 4: Espectroscopia eletrônica de emissão
28/09	Experimento 5: Espectroscopia Raman
05/10	Experimento 6: Efeito da temperatura - Stokes- AntiStokes simultâneo
19/10	<b>P1</b>
26/10	Experimento 7: Raman e FTIR de NaSO <sub>4</sub> , NaNO <sub>3</sub> , NaNO <sub>2</sub> . Atribuição com a Tabela de Caracteres
09/11	Experimento 9: Abaixamento de Simetria – FTIR e/ou Raman Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> e [Y(CO <sub>3</sub> )(OH)] ou CaCO <sub>3</sub>
16/11	Experimento 10: SERS e Raman Ressonante
23/11	Experimento 11: Espectros de Absorção e de Emissão de compostos com íons nf e nd
30/11	Experimento 12: Espectroscopia Upconversion
07/12	<b>P2</b>
21/12	<b>EXAME</b>
22 a 27/08 - 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 <b>18/10 - Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula</b> 28 e 29/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 02/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 14 e 15/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 08 a 10/12 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 08 a 14/12 - Semana de Estudos 15 a 21/12 - 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) 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, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA



Disciplina	
Código	Nome
QG664	Espectroscopia Molecular

Vetor
OF:S-2 T:002 P:000 L:002 O:000 D:000 HS:004 SL:004 C:004 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req
QF536 QI145

Ementa
Teoria de Grupo. Espectroscopia rotacional, roto-vibracional e eletrônica. Experimentos selecionados.

Programa
<p><b>1) Interação da radiação com a matéria:</b> "átomo" clássico, radiação clássica <u>Conceitos:</u> frequência; intensidade da radiação; oscilador harmônico clássico, forçado e com amortecimento (polarizabilidade), absorção e dispersão; larguras de linha; Lei de Lambert-Beer; Medidas experimentais: Aparato experimental para medida de absorção de luz (transmissão/absorção); <u>Relação de experimentos:</u> (i) o conceito clássico de ressonância na absorção de luz: medida da absorvidade molar para diferentes moléculas (ex.: rodamina) e medida experimental da polarizabilidade molecular. Relação entre absorvidade molar e intensidade de absorção; (ii) medida do momento de dipolo elétrico de moléculas polares em solução.</p> <p><b>2) Interação da radiação com a matéria:</b> "átomo" quântico, radiação clássica <u>Conceitos:</u> Coeficientes de Einstein (sistemas de dois níveis); relação entre os coeficientes de Einstein, probabilidade de transição, intensidade de transição e absorvidade molar; Hamiltoniano da interação matéria/radiação; teoria de perturbação dependente do tempo; momento de dipolo de transição; regra de ouro de Fermi; <u>Relação de experimentos:</u> (i) espectrometria de absorção/emissão atômica e comparação com modelo do átomo de hidrogênio; Observação: vários experimentos / coleta de dados podem ser realizados em um único dia.</p> <p><b>3) Espectroscopia Vibracional, rotacional e roto-vibracional de moléculas diatômicas.</b> <u>Conceitos:</u> <u>(I) Vibracional:</u> oscilador harmônico, curva de energia potencial, simetria de funções de onda; regras de seleção; 'overtones'; Atividade no IR e no Raman. <u>(II) Rotacional:</u> rotor rígido; momento angular; distribuição de Boltzmann; regra de seleção e espectroscopia rotacional de absorção e espalhamento Raman; <u>(III) Roto-vibracional:</u> Estrutura rotacional fina.</p> <p>Relação com experimentos: (I) Espectroscopia de absorção no infravermelho de HCl (líquido). Espectroscopia Raman de I<sub>2</sub>. (II) e (III) Rotovibracional de HCl (gás)</p>

4) Espectroscopia vibracional de moléculas poliatômicas

Conceitos: teoria de grupo, modos normais de vibração; frequências características; modos de combinação e 'overtones'. Atividades no Raman e IR.

Relação de experimentos: (i) espectro vibracional do CO<sub>2</sub> e determinação de modos normais a partir de primeiros princípios e por teoria de grupo; (ii) espectro vibracional da água: sólido, líquido e gás; (iii) espectro vibracional: moléculas poliatômicas e teoria de grupo; Observação: vários experimentos / coleta de dados podem ser realizados em um único dia.

5) Espectroscopia eletrônica

Conceitos: átomo de hidrogênio; moléculas diatômicas e poliatômicas; regras de seleção; estrutura vibronica; emissão; teoria do orbital molecular; teoria do campo ligante; teoria de grupo; curvas de energia potencial anarmonicas nos estados fundamental e excitado

Relação de experimentos de espectroscopia eletrônica: (i) moléculas diatômicas: iodo como modelo para absorção e fluorescência; (ii) moléculas poliatômicas: teoria de grupo e TOM; (iii) moléculas poliatômicas: teoria de grupo, teoria do campo ligante; (iv) sólido, líquido e gás.

Observação: vários experimentos / coleta de dados podem ser realizados em um único dia.

**Bibliografia**

**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)