



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre 2023

Disciplina	
Código	Nome
QG664	Espectroscopia Molecular

Turmas	Horário	Local
A	Qua: 08-10	IQ02
A	Qua:10-12	LQ08

Docentes

Diego Pereira dos Santos, santosdp@unicamp.br, Sala I-112
Fernando Aparecido Sigoli, fsigoli@unicamp.br, Sala D-250

Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações

Descrição: A disciplina é composta de uma parte teórica e outra experimental. Todas as semanas teremos ambas as partes sendo conduzidas pelos docentes, iniciando na sala IQ02 e terminando no laboratório LQ08 e/ou em laboratórios de pesquisa do IQ-Unicamp (especificado no calendário abaixo). Para cada aula prática, os discentes deverão elaborar um relatório que fará parte da avaliação final. Além das notas de relatórios, a nota final também será composta das notas referentes a duas provas distribuídas ao longo do semestre.

Prazos de Entrega das Atividades e dos Resultados das Avaliações

Descrição: O prazo para entrega dos relatórios por parte dos discentes é de 7 dias corridos a contar da data de realização do experimento. Os resultados das avaliações de relatórios e provas serão disponibilizados em até 7 dias úteis.

Crítérios de Avaliação e Aprovação

O aproveitamento dos alunos será computado em termos das médias aritméticas das provas (MP) e dos trabalhos (MT). A média final (MF) será calculada através de:

$$MF=0,7MP+0,3MT$$

Caso $2,5 \leq MF < 5$, será necessária a realização de exame. Neste caso a nova média final (MF2) será calculada considerando a nota de exame (NE):

$$MF2=(MF+NE)/2$$

A aprovação na disciplina está condicionada a média final (MF ou MF2) maior ou igual a 5 e presença igual ou superior a 75%.

Forma de Atendimento Extra-Classe

Descrição: O atendimento extra-classe será realizado pelos docentes e PEDs/PADs em horários combinados com a turma

Calendário	
Data	Atividade
02/08	Apresentação da disciplina Local: IQ04
09/08	Revisão de conceitos fundamentais em espectroscopia Local: IQ04
16/08	Experimento 1: Espectroscopia Rotovibracional – Local: LQ08 e Instrumento Ensino ou Cary 660
23/08	Semana da Química - não haverá aula
30/08	Experimento 2: Espectroscopia eletrônica de absorção Local: LQ08 e Instrumento Ensino
06/09	Experimento 3: Espectroscopia eletrônica de emissão Local LQ08 e Instrumento Ensino
13/09	Experimento 4: Espectroscopia Raman Local: Laboratório FTIR- Pesquisa: T64000 ou Xplora
20/09	Experimento 5: Efeito da temperatura - Stokes- Anti-Stokes simultâneo Local: Laboratório FTIR- Pesquisa: T64000
27/09	Não haverá aula
04/10	PROVA 1
11/10	Experimento 6: Raman e FTIR de Na ₂ SO ₄ , NaNO ₃ , NaNO ₂ . Atribuição com a Tabela de Caracteres Local: Laboratório FTIR- Pesquisa: Cary 660
18/10	Experimento 7: Abaixamento de Simetria – FTIR e/ou Raman Na ₂ CO ₃ e [Y(CO ₃)(OH)] ou CaCO ₃ Local: Laboratório FTIR- Pesquisa: Cary 660
25/10	Experimento 8: SERS e Raman Ressonante Local: Laboratório FTIR- Pesquisa: T64000 e/ou Xplora
01/11	Experimento 9: Espectros de Absorção e de Emissão de compostos com íons nf e nd Local: Laboratório FTIR- Pesquisa: Espectrofluorímetro Horiba e UV-Vis - DRS
08/11	Experimento 10: Espectroscopia Upconversion Local: Laboratório FTIR- Pesquisa: Espectrofluorímetro Horiba e UV-Vis - DRS)
15/11	Não haverá aula
22/11	PROVA 2
04 a 09/12	SEMANA DE ESTUDOS
13/12	EXAME

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.

O docente poderá inserir quaisquer outras informações que julgar relevante. Por favor, apagar este texto na versão final

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA

Código: QG664								
Nome: Espectroscopia Molecular								
Nome em Inglês: Molecular Spectroscopy								
Nome em Espanhol: Espectroscopia Molecular								
Tipo de Disciplina: Semanal								
Tipo de Aprovação: Nota e Frequência								
Característica: Regular								
Frequência: 75%								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: Semestral / 2º Período - períodos pares								
Exige Exame: Sim								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
2	2	-	0	-	-	4	15	4
Ocorrência nos Currículos: 5								
Pré-requisitos: QF536 + QI145 ou QF536 + QI146								
Ementa: Teoria de Grupo. Espectroscopia rotacional, roto-vibracional e eletrônica. Experimentos selecionados.								
Programa:								
1) <u>Interação da radiação com a matéria</u> : "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.								
2) <u>Interação da radiação com a matéria</u> : "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.								
3) <u>Espectroscopia Vibracional, rotacional e roto-vibracional de moléculas diatômicas.</u>								
<u>Conceitos</u> :								
(I) <u>Vibracional</u> : oscilador harmônico, curva de energia potencial, simetria de funções de onda; regras de seleção; 'overtones'; Atividade no IR e no Raman.								
(II) <u>Rotacional</u> : rotor rígido; momento angular; distribuição de Boltzmann; regra de seleção e espectroscopia rotacional de absorção e espalhamento Raman;								

(III) Roto-vibracional: Estrutura rotacional fina.

Relação com experimentos:

(I) Espectroscopia de absorção no infravermelho de HCl (líquido). Espectroscopia Raman de I₂.

(II) e (III) Rotovibracional de HCl (gás)

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 CO₂ 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 Básica

- 1) SALA, O. **Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho**. 2a ed. São Paulo: Editora UNESP, 2008. 276 p.
- 2) NAKAMOTO, K. **Infrared and Raman spectra of Inorganic and Coordination Compounds – Part A and Part B**. 6th ed. New York: John Wiley, 2009.
- 3) ATKINS, P., DE PAULA, J. **Physical Chemistry**. 9th ed. New York: W.H. Freeman and Company, 2010, 1010 p.
- 4) MCQUARRIE, D.A., SIMON, J.D. **Physical Chemistry: a Molecular Approach**. University Science Books, 1997. 1360 p.

Bibliografia Complementar

- 1) MIESSLER, G. L., TARR, D. A. **Inorganic Chemistry**. 4th ed., Harlow: Pearson, 2011. 1213 p.
- 2) KETTLE, S. F. A. **Symmetry and Structure: (Readable Group Theory for Chemists)**. 2nd ed. Chichester: John Wiley, 1995. 416 p.
- 3) LEVER, A. B. P. **Inorganic Electronic Spectroscopy**. 2nd ed. Amsterdam: Elsevier, 1984. 863 p.
- 4) HARRIS, D.C., BERTOLUCCI, M.D. **Symmetry and Spectroscopy**. 1a ed. revisada. Dover Publications, 1989. 576 p.
- 5) SKOOG, D.A., HOLLER, F.J., CROUCH, S.R. **Principles of Instrumental Analysis**. 7th ed. Cengage Learning, 2017. 992 p.