



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre 2024

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 e Lab Multiusuários

Docentes

Fernando Aparecido Sigoli fsigoli@unicamp.br
René Alfonso Nome Silva 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
07/08	Apresentação da disciplina Revisão de Alguns Conceitos Fundamentais em Espectroscopia
24/08	Experimento 1: Espectroscopia Rotacional – Local: D-129
21/08	SEMANA DA QUÍMICA
28/08	Experimento 2: Espectroscopia Rotovibracional – Local: Ensino LQ 08 ou Cary 660
04/09	Experimento 3: Espectroscopia Raman – Local: T64000 ou Xplora
11/09	Experimento 4: Efeito da Temperatura – Stokes e anti-Stokes simultâneo Local: T64000 ou Xplora
18/09	Experimento 5: Espectroscopia eletrônica de absorção – Local Ensino LQ 08
25/09	Aula Teórica e Discussão dos Experimentos de 1 a 5
02/10	Avaliação # 1
09/10	Experimento 6: Raman e FTIR de NaSO ₄ , NaNO ₃ , NaNO ₂ . Atribuição com a Tabela de Caracteres - Local: Cary 660
16/10	Experimento 7: Abaixamento de Simetria – FTIR e/ou Raman Na ₂ CO ₃ e [Y(CO ₃)(OH)] ou CaCO ₃ Local: Cary 660
23/10	Experimento 8: SERS e Raman Ressonante Local: T64000 e/ou Xplora
30/10	Experimento 9: Espectros de Absorção e de Emissão de compostos com íons nf e nd Local: Espectrofluorimetro Horiba e UV-Vis - DRS
06/11	Experimento 10: Espectroscopia Upconversion Local: Espectrofluorimetro Horiba e UV-Vis - DRS
13/11	Aula Teórica e Discussão dos Experimentos de 6 a 10
20/11	Avaliação # 2
11/12	Exame
19 a 23/08 - 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 15/10 - Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula 28/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 02/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 15 e 16/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 20/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 02 a 07/12 - Semana de Estudos 09 a 14/12 - Semana de Exames	

SEGUEM A EMENTA, O PROGRAMA E A 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.