



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA
PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA



2º Semestre 2025

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
João Paulo Vita Damasceno, joaopvd@unicamp.br, Sala I-239

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.

CrITÉRIOS 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
06/08	Início do semestre
24/09	Prova 1
26/11	Prova 2
10/12	Exame
18 a 22/08 - Semana da Química - não haverá aula para as disciplinas dos cursos 05/50. 15/10 - Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula 27 e 28/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 15/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 20 a 22/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 01 a 06/12 - Semana de Estudos 08/12 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 09 a 15/12 - 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) 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. (4) INSTRUÇÃO NORMATIVA CCG Nº 02/2025 Cláusula de Honestidade e Lisura Acadêmica: Todas as atividades relacionadas às disciplinas devem ser realizadas em conformidade com as orientações fornecidas pelos docentes e com o devido rigor ético. Caso o(a) docente responsável, no exercício de sua liberdade de cátedra, forme convicção acerca da ausência de lisura ou de condições adequadas para a realização da atividade avaliativa, poderá atribuir nota zero, seja para a atividade única ou, conforme o caso, para o conjunto de atividades do semestre. A ocorrência deverá ser fundamentada e comunicada à Coordenação de Curso de Graduação, podendo o(a) estudante estar sujeito a processo administrativo.

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 'overtone's'. 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.