



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre - 2020

Disciplina	
Código	Nome
QG664	Espectroscopia Molecular

Turmas	Horário	Local
A	Qua	Classroom

Docentes

Diego Pereira dos Santos, santosdp@unicamp.br
André Luiz Barboza Formiga, formiga@unicamp.br
René Alfonso Nome Silva, nome@unicamp.br

Docentes

Docente responsável pela condução remota das atividades

Docente(s) responsável(is) pela condução das aulas presenciais

Os docentes irão se alternar na condução remota e presencial da disciplina

Disciplinas Experimentais – Plano de Ação IQ 2S/2020

As disciplinas experimentais do 2S/2020, em virtude da pandemia de COVID-19 e da necessidade de manutenção de distanciamento social, serão conduzidas em sistema de rodízio. Os laboratórios tiveram sua capacidade reduzida para 1/3 de sua capacidade e os experimentos serão conduzidos, preferencialmente, de forma individual. Serão matriculados, por turma, no máximo, 2/3 da capacidade. A cada semana, metade dos alunos terão aula remota com um docente responsável por conduzir essa atividade e a outra metade fará aula presencial, alternando na semana seguinte. Os processos avaliativos devem ser conduzidos de forma remota. O início do sistema de rodízio está condicionado a autorização de retorno pelas autoridades de saúde e Reitoria da Unicamp e será comunicado com a devida antecedência aos alunos.

Forma de Condução das Aulas Remotas Mediadas por Tecnologia

Aulas online síncronas (ao vivo)

Aulas Gravadas

Aulas online ao vivo + disponibilização da gravação da aula

Descrição: Todas as aulas (teóricas e discussão de experimentos) serão realizadas via google meet. Serão realizadas gravações de discussões teóricas e de experimentos, as quais serão disponibilizadas para os alunos. Nas quartas-feiras (10:00-11:00) serão realizadas discussões de dúvidas levantadas pelos alunos via google meet.

Forma de Atendimento às Dúvidas das Aulas Remotas

Descrição: Todas as quartas-feiras, entre 10 e 11 hrs, serão realizados atendimentos às dúvidas das aulas gravadas. Este atendimento será feito através da plataforma google meet.

Plataforma Virtual que se pretende utilizar
<input checked="" type="checkbox"/> Google Classroom + Google Meet
<input type="checkbox"/> Moodle
Outra (especificar):

Forma de Condução das Avaliações e Prazos de Entrega
Descrição: A disciplina conta com duas provas (P1 e P2) e trabalhos associados ao tratamento de dados e discussão de espectros a serem fornecidos pelos docentes nas aulas. As provas terão prazo de devolução de 48 horas e os trabalhos de 7 dias.

Critérios de Avaliação e Aprovação
Descrição: 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 $MF < 5$, 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.

Calendário – Experimentais - Planeamento		
(incluir a data de todas as atividades avaliativas, inclusive exame)		
Data	Experimentos – Discussão Remota	Experimentos – Execução Presencial
	Todos os experimentos serão discutidos em aulas remotas durante o curso posteriormente à introdução teórica.	
Datas de provas:		
11/11/2020: Entrega da prova 1 (P1). Horário: 11:00. Prazo de devolução: 48 hrs		
13/01/2021: Entrega da prova 2 (P2). Horário: 11:00. Prazo de devolução: 48 hrs		
20/01/2021: Entrega do exame. Horário: 11:00. Prazo de devolução: 48 hrs		
Não haverá atividades nas seguintes datas:		
21 a 23/10 – Congresso de Iniciação Científica (no período em que estiver sendo realizado o congresso os alunos que participarem do evento estarão dispensados das aulas.)		
28/10 – Não haverá atividades		
23 a 27/11 – Semana da Química Virtual – Não haverá aula, sendo considerado dia letivo.		
25/11 – Reunião de Avaliação de Curso		
24 a 31/12 – Não haverá atividades (recesso).		
19/01 – Término das Aulas do 2S/2020		
20 a 26/01 – Semana de Exames Finais do 2S/2020		

Outras informações relevantes

Exemplo: recomendações para trabalho em laboratório, informações sobre avaliações substitutivas, caso sejam previstas, indicações de atividades extra-sala (importante quando a disciplina contém vetor O), etc.

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 <u>1) Interação da radiação com a matéria: "átomo" clássico, radiação clássica</u> Conceitos: 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); Relação de experimentos: (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. <u>2) Interação da radiação com a matéria: "átomo" quântico, radiação clássica</u> Conceitos: 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; Relação de experimentos: (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. <u>3) Espectroscopia Vibracional, rotacional e roto-vibracional de moléculas diatômicas.</u> Conceitos: <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. Relação com experimentos: (I) Espectroscopia de absorção no infravermelho de HCl (líquido). Espectroscopia Raman de I ₂ . (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

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)