



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre 2021

Disciplina	
Código	Nome
QG664	Espectroscopia Molecular

Turmas	Horário	Local
QUA	8-12h	Classroom

Docentes

Diego Pereira dos Santos, santosdp@unicamp.br
Fernando Aparecido Sigoli; fsigoli@unicamp.br

Disciplinas Experimentais – Plano de Ação IQ 2S/2021

As disciplinas experimentais do 2S/2021, em virtude da pandemia de COVID-19 e da necessidade de manutenção de distanciamento social, serão conduzidas integralmente de forma remota e mediada por tecnologia, **incluindo os processos avaliativos.**

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. As aulas poderão ser síncronas ou gravadas e abordarão as discussões teóricas e de experimentos. Todas as aulas serão disponibilizadas aos alunos.

Forma de Atendimento às Dúvidas das Aulas Remotas

Descrição: Todas as quartas-feiras, entre 11 as 12 hrs, serão realizados atendimentos às dúvidas das aulas gravadas. Este atendimento será feito através da plataforma google meet.

Plataforma Virtual que se pretende utilizar

- Google Classroom + Google Meet
 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 – Disciplinas Experimentais

Data	Atividade
Datas das Avaliações	
06/10/2021:	Entrega da prova 1 (P1). Horário: 11:00. Prazo de devolução: 48 hrs
01/12/2021:	Entrega da prova 2 (P2). Horário: 11:00. Prazo de devolução: 48 hrs
15/12/2021	Entrega do exame. Horário: 11:00. Prazo de devolução: 48 hrs

Não haverá atividades nas seguintes datas:

09 a 14/08: Semana da Química – Não haverá aula, sendo considerado dia letivo.

06 e 07/09 - Não haverá atividades

11 e 12/10 - Não haverá atividades

29 e 30/10 - Não haverá atividades

01 e 02/11 - Não haverá atividades

15/11 - Não haverá atividades

20/11 - Não haverá atividades

08/12 - Não haverá atividades

09 a 14/12 - Semana de Estudos

14/12 - Término das Aulas

15 a 21/12 - Semana de Exames Finais

Outras informações relevantes

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>1) Interação da radiação com a matéria: "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>2) Interação da radiação com a matéria: "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>3) Espectroscopia Vibracional, rotacional e roto-vibracional de moléculas diatômicas. <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 I₂. (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 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)