



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre - 2020

Disciplina	
Código	Nome
QI-446	Aplicação de Teoria de Grupo em Espectroscopia Eletrônica e Vibracional

Turmas	Horário	Local
A	Qui: 19-21h	Online

Docentes
Prof. André Luiz B. Formiga, formiga@unicamp.br , sala I-104

Disciplinas Teóricas – Plano de Ação IQ 2S/2020
As disciplinas teóricas do 2S/2020, 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
<input type="checkbox"/> Aulas online síncronas (ao vivo) <input checked="" type="checkbox"/> Aulas Gravadas <input type="checkbox"/> Aulas online ao vivo + disponibilização da gravação da aula
Descrição:

Forma de Atendimento às Dúvidas das Aulas Remotas
Descrição: semanalmente durante o horário da disciplina usando Google Meet e através de mensagens na plataforma Google Classroom

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: As avaliações serão realizadas através da plataforma Google Classroom e terão prazo de 72h para entrega de respostas após a disponibilização das questões.
Critérios de Avaliação e Aprovação
Descrição: Serão realizadas duas provas. $NP = (P1+P2)/2$ Se $NP \geq 5,0$, $NF = NP$ Se $NP < 2,5$ $NF = NP$ (reprovação) sem exame. Se $2,5 \leq NP < 5,0$ o aluno terá direito a fazer Exame. Neste caso, $NF = (NP + Exame)/2$. Se $NF \geq 5,0$ (aprovação)

Calendário – Disciplinas Teórica**11/11/2020 – 1ª. Prova (data da divulgação de questões)**

21 a 23/10 – Congresso de Iniciação Científica

23 a 27/11 – Semana da Química Virtual – Não haverá aula

24 a 31/12 – Não haverá atividades (recesso)

13/01/2021 – 2ª. Prova (data da divulgação de questões)

19/01 – Término das Aulas do 2S/2020

20/01/2021 – Exame (data da divulgação de questões)**Outras informações relevantes**

Não haverá avaliação substitutiva.

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA



Disciplina

Código	Nome
QI446	Aplicação de Teoria de Grupo em Espectroscopia Eletrônica e Vibracional

Vetor

OF:S-2 T:002 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:002 SL:002 C:002 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req

QI245/ QI246

Ementa

Teoria de Grupo. Espectroscopias eletrônica e vibracional aplicadas a compostos inorgânicos. Interpretação de espectros.

Programa

Teoria de grupo; representação matricial das operações de simetria, produto direto, construção de tabelas de caracteres por regras matemáticas e por operações de simetria sobre os graus de liberdade de uma molécula C_{2v} , representações redutíveis e irredutíveis, utilização de operadores de projeção para a construção de combinações lineares adaptadas por simetria, tabelas de correlação.
Fundamentos de espectroscopia (radiação eletromagnética-regiões/faixa de frequências/técnicas; Teorias Clássica e Quântica de interpretação da radiação).
Transições eletrônicas/vibracionais/rotacionais, associando-as com as regiões espectrais e técnicas de análise.
Aplicações da teoria de grupo para a estrutura eletrônica de compostos de coordenação e organometálicos.
Espectro eletrônico (absorção e emissão); espectro vibracional (IV e Raman); regras de seleção e o efeito de acoplamento vibrônico.
Modos fundamentais ou normais de vibração (p.ex. XY_2 , XY_3 , XY_4 e XY_6) e abaixamento de simetria.
Interpretação de espectros eletrônicos e vibracionais de compostos inorgânicos.

Bibliografia

Bibliografia Básica
G. L. Miessler, D. A. Tarr. Inorganic Chemistry. 4th ed., Harlow : Pearson, 2011. 1213p.
O. Sala. Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho. 2a ed. São Paulo: Editora UNESP, 2008. 276p.
K. Nakamoto. Infrared and Raman spectra of Inorganic and Coordination Compounds – Part A and Part B. 6th ed. New York: John Wiley, 2009.
A. B. P. Lever. Inorganic Electronic Spectroscopy. 2nd ed. Amsterdam: Elsevier, 1984. 863p.
Bibliografia Complementar
S. F. A. Kettle. Symmetry and Structure: (Readable Group Theory for Chemists). 2nd ed. Chichester : John Wiley, 1995. 416p.
F. A. Cotton. Chemical Applications of Group Theory. 3th ed. New York: John Wiley, 1990. 461p.
G. M. Oliveira; Simetria de Moléculas e Cristais: Fundamentos da Espectroscopia Vibracional. Porto Alegre : Bookman, 2009. 269p.
Material bibliográfico selecionado pelo docente.

Crêterios de Avaliaçãõ

Crêterios de avaliaçãõ definidos pelo Professor, com base no disposto na Seçãõ I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliaçãõ do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduaçãõ. Frequência: 75 % (* O abono de faltas serã considerado dentro do previsto no capítulo VI, seçãõ X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduaçãõ)