



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre - 2019

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

Turmas	Horário	Local
A	Quartas-feiras - 14:00h as 16:00H	IQ - 04
B	Quintas-feiras - 19:00h as 21:00H	IQ - 01

Docentes
<b>Prof. Fernando Aparecido Sigoli; Sala D-252; fsigoli@unicamp.br</b>

Critérios de Avaliação e Aprovação
$M_A = \left( \frac{A1 + A2}{2} \right)$ <ul style="list-style-type: none"><li>• Se <math>M_A &lt; 2,5</math> → aluno está <b>Reprovado</b> sem direito a exame.</li><li>• Se <math>M_A \geq 5,0</math> → aluno está <b>Aprovado</b>.</li><li>• Se <math>M_A &lt; 5,0</math> ou nota inferior a 4,0 em qualquer uma das avaliações, o aluno fará <b>Exame</b>; neste caso a <math>M_{Final} = \frac{M_A + Exame}{2}</math> e, assim:<ul style="list-style-type: none"><li>• <math>M_{Final} \geq 5,0</math> → o aluno será <b>Aprovado</b>;</li><li>• <math>M_{Final} &lt; 5,0</math> → o aluno será <b>Reprovado</b></li></ul></li></ul>

Calendário
<b>Início das Aulas:</b>
<b>14/08 – Turma A</b>
<b>15/08 – Turma B</b>
<b>Avaliações e exame.</b>
<b>02/10</b> → 1ª Avaliação (A1 – Turma A)
<b>03/10</b> → 1ª Avaliação (A1 – Turma B)
<b>27/11</b> → 2ª Avaliação (A2 – Turma A)
<b>28/11</b> → 2ª Avaliação (A2 – Turma B)
<b>02-06/12</b> → Semana de estudos
<b>11/12</b> → EXAME (Turma A)
<b>12/12</b> → EXAME (Turma B)

**Outras informações relevantes****Tutoria**

Ao final de cada aula, uma lista de exercícios poderá ser disponibilizada para ser resolvida como forma de estudos. Estas listas não serão avaliadas e, portanto, não farão parte do somatório da média final. Entretanto, é aconselhável resolvê-las e procurar os PEDs semanalmente e o Professor nos casos de todas as atividades avaliativas, inclusive exame

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
INSTITUTO DE QUÍMICA



**PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS**

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. <b>Interpretação de espectros.</b>

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 irreduzíveis, 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/vibronais/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. <b>Interpretação de espectros eletrônicos e vibracionais de compostos inorgânicos.</b>

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. <b>Material bibliográfico selecionado pelo docente.</b>

**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)