

ESPECTROSCOPIA ÓPTICA

Pré-requisitos: CQ115/CQ246
Carga horária: 02 horas / semana
Horário (turma Q9P-D, diurno): sextas-feiras de 9:30 h às 11:30 h
Professor: Joaquim D. Da Motta Neto

Código: CQ247
Créditos: 02
Sala: PQ-15

I. Conteúdo programático geral.

- i) **Aspectos gerais de espectroscopia.** Interação da radiação com a matéria. Técnicas espectroscópicas.
- ii) **Espectroscopia rotacional.** Modelo do rotor rígido. Momento de inércia. Espectro rotacional.
- iii) **Espectroscopia vibracional.** Regras de seleção vibracionais. Modos normais de vibração.
- iv) **Espectroscopia eletrônica.** Princípio de Franck-Condon. Evolução de estados eletrônicos. Fluorescência e fosforescência. Lasers.
- v) **Espectroscopia de fotoelétrons.** UPS e XPS. Interpretação. Revisão de cálculos SCF. Solução de determinantes. Simetria pontual. Tabelas de caracteres.

O material de apoio estará disponível no *site*

<http://www.quimica.ufpr.br/paginas/joaquim-motta/CQ247> até o dia **3 de julho de 2026**.

II. Avaliação: a nota dependerá de dois itens: a frequência do aluno e seu desempenho no corpo de tarefas designada pelo professor responsável. A frequência mínima **exigida** é de 75% das aulas ministradas. Assim sendo, será considerado reprovado por falta (RF) o aluno que não atingir esta frequência. Casos extraordinários (falta por doença etc.) serão resolvidos a critério do professor responsável. Serão considerados aprovados por média (AM) os alunos que, além de obterem a frequência mínima, atingirem média igual ou superior a 70 (setenta) após computada a nota de três provas escritas, a serem aplicadas nas seguintes datas:

10 de abril – 15 de maio – 26 de junho

Recomenda-se que o aluno procure construir uma boa média desde o começo, quando a quantidade de matéria é menor. O objetivo é conseguir um mínimo de **210** pontos na soma das três provas parciais.

Consulte o professor em caso de dúvida ! Não espere até a última hora !

Será aplicado um exame final na **sexta-feira, 3 de julho de 2026**. Serão considerados aprovados após o exame final (AF) os alunos que alcançarem média final igual ou superior a 50 (cinquenta).

O gabarito de cada prova estará disponível para consulta. Em caso de dúvida, o professor responsável estará disponível para esclarecimentos. Recomenda-se que cada aluno esteja constantemente a par de sua situação, de modo a evitar situações de última hora.

O professor tem de se preocupar com uma turma inteira, por isso ele não pode ser responsável por um aluno apenas. Cada aluno é responsável por tomar a iniciativa de procurar o auxílio do professor se achar necessário.

III. Bibliografia:

- P. Atkins & J. de Paula, *Físico-Química*, vol. 2, 7ª. Edição, LTC, Rio de Janeiro, 2003. Capítulos 6-8.
- I.N. Levine, *Quantum Chemistry*, 4a. ed., McGraw-Hill, New York. Seção 15.12.
- J.D.M. Vianna, A. Fazzio & S. Canuto, *Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos*, Livraria da Física, SP, 2004.
- E. Hollauer, *Química Quântica*, LTC, Rio de Janeiro, 2009.
- D.C. Harris e M.D. Bertolucci, *Symmetry and Spectroscopy*, Dover, New York, 1989.
- D.A. McQuarrie e J.D. Simon, *Physical Chemistry*, University Science Books, Sausalito, 1997.

IV. Intenção de cronograma:

Primeira parte: Aspectos gerais. Espectroscopia rotacional (Atkins, vol. 2, cap. 6).

23 de fevereiro	Início do primeiro semestre do ano letivo de 2026.
27 de fevereiro	Aula 1. Apresentação. Leitura do <i>syllabus</i> . Aspectos gerais de espectroscopia. Técnicas experimentais. Interação da radiação com a matéria.
6 de março	Aula 2. Modelo do rotor rígido. Momento de inércia.
13 de março	Aula 3. Espectros de rotação pura.
20 de março	Aula 4. Transições rotacionais. Espectros Raman de rotação.
27 de março	Aula 5. Revisão e exercícios.
3 de abril	Feriado religioso. Sexta-feira Santa.
10 de abril	Primeira prova. Toda a matéria das cinco primeiras aulas.

Segunda parte: Espectroscopia vibracional (Atkins, vol. 2, cap. 6).

17 de abril	Aula 6. Vibrações moleculares. Regras de seleção. Anarmonicidade.
21 de abril	Feriado nacional. Dia de Tiradentes.
24 de abril	Aula 7. Vibrações de moléculas poliatômicas. Modos normais de vibração.
1 de maio	Feriado mundial. Dia do trabalho.
8 de maio	Aula 8. Espectros Raman de vibração.
8 de maio	Aula 9. Revisão e exercícios.
15 de maio	Segunda prova. Toda a matéria da sexta à nona aulas.

Terceira parte: Espectroscopia eletrônica (Atkins, vol. 2, cap. 7).

22 de maio	Aula 10. Transições eletrônicas. Princípio de Franck & Condon.
29 de maio	Aula 11. Evolução de estados eletrônicos. Fluorescência e fosforescência.
4 de junho	Feriado religioso. Dia de <i>Corpus Christi</i> .
5 de junho	Aula 12. Lasers.
12 de junho	Aula 13. Espectroscopia de fotoelétrons. UV e raios x.
19 de junho	Aula 14. Revisão e exercícios.
26 de junho	Terceira prova. Toda a matéria das quatro últimas aulas
27 de junho	Último dia letivo do Primeiro Semestre de 2026.
3 de julho	Exame final do Primeiro Semestre de 2026.