



PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS

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> (I) Vibracional: oscilador harmônico, curva de energia potencial, simetria de funções de onda; regras de seleção; 'overtones'; Atividade no IR e no Raman. (II) Rotacional: rotor rígido; momento angular; distribuição de Boltzmann; regra de seleção e espectroscopia rotacional de absorção e espalhamento Raman; (III) Roto-vibracional: Estrutura rotacional fina.</p> <p><u>Relação com experimentos:</u> (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)