



PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS

Disciplina	
Código	Nome
QI445	Introdução à Espectroscopia 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
Fundamentos de espectroscopia vibracional e interpretação de espectros.

Programa
<ul style="list-style-type: none">- Fundamentos (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;- Níveis de energia de moléculas diatômicas;- Espectro vibracional - Regras de seleção para IV e Raman;- Modelo Clássico de absorção de energia para vibração;- Modelo Quântico de absorção de energia para vibração;- Modos fundamentais ou normais de vibração;- Tipos de vibrações moleculares;- Moléculas diatômicas: modos normais de vibração, tabela de caracteres, análise das frequências de vibração, correlação com força de ligação;- Moléculas X3 e YXY, lineares e angulares (aqui explorar também a análise das frequências de vibração para moléculas XH2 e feitos isotópicos);- Moléculas XY3;- Moléculas XY4, ZXY3; e Z2XY2: utilizar Tabelas de Correlação;- Frequências de Grupo e atribuição de bandas;- Espectro IV para moléculas complexas utilizando-se frequências de grupo: complexos de coordenação, efeito da coordenação, natureza do átomo central;- Complexos com NH3; nitro-nitrito; sulfatos; carbonilas;- Ligações de hidrogênio e associações moleculares;- ATR e DRIFTS,- Visita ao equipamento;- Técnicas de amostragem;- Preparação de amostras versus qualidade de espectro, para as amostragens mais usuais (efeito de concentração, caminho ótico; dispersão da amostra).

Bibliografia
K. Nakamoto, Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds, 4th Ed. New York, 1986. L.J.Bellamy, "The infrared spectra of complexes", 2nd Ed., London, Meuthuen , 1966. L.J.Bellamy, "Advances in infrared group frequencies", 2nd Ed., London, Meuthuen, 1968.

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)