



**PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS**

<b>Disciplina</b>	
<b>Código</b>	<b>Nome</b>
QI446	Aplicação de Teoria de Grupo em Espectroscopia Eletrônica e Vibracional

<b>Vetor</b>
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%

<b>Pré-Req</b>
QI245/ QI246

<b>Ementa</b>
Teoria de Grupo. Espectroscopias eletrônica e vibracional aplicadas a compostos inorgânicos. Interpretação de espectros.

<b>Programa</b>
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.

<b>Bibliografia</b>
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.

**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)