

Código: <b>QG664</b>								
Nome: <b>Espectroscopia Molecular</b>								
Nome em Inglês: <b>Molecular Spectroscopy</b>								
Nome em Espanhol: <b>Espectroscopia Molecular</b>								
Tipo de Disciplina: <b>Semanal</b>								
Tipo de Aprovação: <b>Nota e Frequência</b>								
Característica: <b>Regular</b>								
Frequência: <b>75%</b>								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: <b>Semestral / 2º Período - períodos pares</b>								
Exige Exame: <b>Sim</b>								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
<b>2</b>	<b>2</b>	-	<b>0</b>	-	-	<b>4</b>	<b>15</b>	<b>4</b>
Ocorrência nos Currículos: <b>5</b>								
Pré-requisitos: <b>QF536 + QI145 ou QF536 + QI146</b>								
Ementa: <b>Teoria de Grupo. Espectroscopia rotacional, roto-vibracional e eletrônica. Experimentos selecionados.</b>								
<p>Programa:</p> <p>1) <u>Interação da radiação com a matéria</u>: “átomo” clássico, radiação clássica</p> <p><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);</p> <p><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) <u>Interação da radiação com a matéria</u>: “átomo” quântico, radiação clássica</p> <p><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;</p> <p><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) <u>Espectroscopia Vibracional, rotacional e roto-vibracional de moléculas diatômicas.</u></p> <p><u>Conceitos</u>:</p> <p>(I) <u>Vibracional</u>: oscilador harmônico, curva de energia potencial, simetria de funções de onda; regras de seleção; ‘overtones’; Atividade no IR e no Raman.</p> <p>(II) <u>Rotacional</u>: rotor rígido; momento angular; distribuição de Boltzmann; regra de seleção e espectroscopia rotacional de absorção e espalhamento Raman;</p>								

(III) Roto-vibracional: Estrutura rotacional fina.

Relação com experimentos:

(I) Espectroscopia de absorção no infravermelho de HCl (líquido). Espectroscopia Raman de I<sub>2</sub>.

(II) e (III) Rotovibracional de HCl (gás)

#### 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 CO<sub>2</sub> 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 Básica**

- 1) SALA, O. **Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho**. 2a ed. São Paulo: Editora UNESP, 2008. 276 p.
- 2) NAKAMOTO, K. **Infrared and Raman spectra of Inorganic and Coordination Compounds – Part A and Part B**. 6th ed. New York: John Wiley, 2009.
- 3) ATKINS, P., DE PAULA, J. **Physical Chemistry**. 9th ed. New York: W.H. Freeman and Company, 2010, 1010 p.
- 4) MCQUARRIE, D.A., SIMON, J.D. **Physical Chemistry: a Molecular Approach**. University Science Books, 1997. 1360 p.

#### **Bibliografia Complementar**

- 1) MIESSLER, G. L., TARR, D. A. **Inorganic Chemistry**. 4th ed., Harlow: Pearson, 2011. 1213 p.
- 2) KETTLE, S. F. A. **Symmetry and Structure: (Readable Group Theory for Chemists)**. 2nd ed. Chichester: John Wiley, 1995. 416 p.
- 3) LEVER, A. B. P. **Inorganic Electronic Spectroscopy**. 2nd ed. Amsterdam: Elsevier, 1984. 863 p.
- 4) HARRIS, D.C., BERTOLUCCI, M.D. **Symmetry and Spectroscopy**. 1a ed. revisada. Dover Publications, 1989. 576 p.
- 5) SKOOG, D.A., HOLLER, F.J., CROUCH, S.R. **Principles of Instrumental Analysis**. 7th ed. Cengage Learning, 2017. 992 p.