

Código: QI445								
Nome: Introdução à Espectroscopia Vibracional								
Nome em Inglês: Introduction to Vibrational Spectroscopy								
Nome em Espanhol: Introducción a la Espectroscopia Vibracional								
Tipo de Disciplina: Semanal								
Tipo de Aprovação: Nota e Frequência								
Característica: Regular								
Frequência: 75%								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: Semestral / 2º Período - períodos pares								
Exige Exame: Sim								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
2	-	-	-	-	-	2	15	2
Ocorrência nos Currículos: 63								
Pré-requisitos: QI245 ou QI246								
Ementa: Fundamentos de espectroscopia vibracional e interpretação de espectros.								
<p>Programa:</p> <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 Básica								
1) NAKAMOTO, K. Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds , 4th Ed. New York, 1986.								
2) BELLAMY, L.J. "The infrared spectra of complexes" , 2nd Ed., London, Meuthuen, 1966.								
3) BELLAMY, L.J. "Advances in infrared group frequencies" , 2nd Ed., London, Meuthuen, 1968.								