



**MEC - UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
DECANATO DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA**

PROGRAMA ANALÍTICO

DISCIPLINA

| | |
|--|---|
| CÓDIGO: IC 1344 CRÉDITOS: 4 (T 4) | NOME: ESPECTROSCOPIA Cada crédito corresponde a 15 horas de aula |
|--|---|

| |
|-------------------------------------|
| DEPARTAMENTO DE QUÍMICA |
| INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS |

OBJETIVO DA DISCIPLINA: Introduzir aos alunos conceitos de espectroscopia vibracional e eletrônica

| |
|--|
| EMENTA: 1. Simetria e Teoria de Grupos 2. Conceitos Básicos de Mecânica quântica 3. Espectroscopia Vibracional 4. Espectroscopia Eletrônica |
|--|

| |
|--|
| PROGRAMA ANALÍTICO: 1. Teoria de Grupos 1.1. Operações de simetria 1.2. Grupos e grupos de ponto 1.3. Classificação das moléculas em grupos de ponto 1.4 Representação matricial das operações de simetria 1.5 Caracteres e tabela de caracteres 2. Introdução à Mecânica Quântica 2.1. Luz. Interação radiação/matéria 2.2. Postulados da Mecânica Quântica 2.3. Exemplos: partícula na caixa, oscilador harmônico |
|--|

3. Espectroscopia Vibracional

- 3.1. IV e Raman
- 3.2 Diatômicas: rotação, vibração
- 3.3 Transições entre estados estacionários: integral de momento de transição
- 3.4 Modos normais de vibração de politômicas
- 3.5 Regras de seleção
- 3.6 Coordenadas de simetria, análise dos modos de estiramento
- 3.7 Atribuições das bandas de um espectro real
- 3.8 Análise de grupos funcionais

4. Teoria do Orbital Molecular

- 4.1 Átomos
- 4.2 Espectroscopia de fotoelétrons
- 4.3 Método LCAO
- 4.4 Moléculas Diatômicas
- 4.5 Moléculas Poliatômicas
- 4.6 Método de Hückel

5. Espectroscopia Eletrônica

- 5.1 Noções básicas
- 5.2 Regras de seleção
- 5.3 Espectro eletrônico de diatômicas
- 5.4 O percurso da energia absorvida: processos radioativos e não radioativos de relaxação
- 5.5 Pares isolados, ligações duplas e triplas
- 5.6 Método de Hückel
- 5.7 Análise vibracional

BIBLIOGRAFIA:

- **Chemical Applications of Group Theory** ~F.A. Cotton, John Wiley & Sons Inc.
- **Symmetry and Spectroscopy: Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy** Daniel C Harris, Michael D Bertolucci, Oxf. UP (NY)
- **Introduction to Molecular Spectroscopy** - Gordon M Barrow, McGraw