

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ / SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA / DISCIPLINAS DE PÓS-GRADUAÇÃO**

Disciplina: Espectroscopia Vibracional e Eletrônica

Natureza: Teórica / Semestral

Carga Horária Total: 60h

CÓDIGO: QUIM7007

Área de Concentração: Química Inorgânica

Carga Horária Semanal: 04h

EMENTA:

TEORIA DE GRUPO E SIMETRIA MOLECULAR APLICADA AO ESTUDO DE ESPECTROSCOPIA.

ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL NA REGIÃO DO INFRAVERMELHO E RAMAN: Espectros vibracionais no IV e Raman: origem molecular dos fenômenos de absorção e espalhamento de luz, formato dos espectros, instrumentação. Moléculas diatômicas, poliatômicas. Análise de modos vibracionais e aplicações em compostos inorgânicos. ESPECTROSCOPIA ELETRÔNICA: Estrutura Eletrônica: átomos polieletrônicos. Teoria do Campo Cristalino/Ligante. Teoria dos Orbitais Moleculares aplicada à interpretação de espectros eletrônicos de compostos de coordenação. Diagrama de níveis de energia. Aplicações.

OBJETIVOS: Discutir os fundamentos teóricos e fornecer subsídios para a compreensão dos fenômenos de absorção e espalhamento de radiação eletromagnética. Interpretação de espectros eletrônicos e vibracionais baseado em conceitos e princípios da mecânica quântica, teoria de grupo e simetria molecular. Aplicação para compostos inorgânicos.

CONTEÚDOS PROGRAMÁTICOS (Parte de Teoria de Grupos, Simetria Molecular e Espectroscopia Vibracional):

1. Teoria de Grupos e Simetria Molecular:

Grupos: Propriedades, Subgrupo, Transformações de similaridade, classe

Operações e elementos de simetria em moléculas: Grupos pontuais e projeção estereográfica, classificação das moléculas em grupos pontuais de simetria

Representação matricial das operações de simetria: representações reduzíveis e irreduzíveis, caracteres e tabelas de caracteres, decomposição de representações reduzíveis e produto direto

2. Espectroscopia Vibracional:

Espectros vibracionais no IV e Raman: origem molecular do fenômeno, formato dos espectros, instrumentação.

Moléculas diatômicas:

Oscilador harmônico: Funções de onda e níveis de energia vibracionais, população dos níveis de energia, regra de seleção e intensidade de bandas vibracionais.

Oscilador anarmônico: Potencial de Morse, constante de anarmonicidade, transições fundamental e sobretons.

Espectros roto-vibracionais: Ramos Q, P e R, O e S. Análise do espectro do monóxido de carbono

Moléculas poliatômicas:

Modos normais de vibração e Procedimento sistemático para a determinação das simetrias dos modos normais de vibração de uma molécula. Exemplos.

Regras de seleção e polarização no IV e Raman: relação entre a integral do momento de transição e a simetria dos modos normais de vibração

Coordenadas de simetria: Procedimento sistemático para a construção de coordenadas de simetria de vibrações de estiramento e deformação. Exemplos.

Aplicação: análise de modos de estiramento de alguns compostos: determinação do número de bandas e distinção entre isômeros por espectroscopia vibracional

Demonstração e estudo de modos vibracionais de diversas moléculas (visualização de animações de modos vibracionais por meio de mecânica-quântica, encontradas em diversos sítios da Internet).

REFERÊNCIAS BÁSICAS:

ENGEL, T. Quantum chemistry and spectroscopy. 3rd ed. London: Pearson, 2013.

LARKIN, P. Infrared and Raman Spectroscopy. Principles and Spectral Interpretation. San Diego: Elsevier, 2011.

DE OLIVEIRA, G. M. Simetria de moléculas e cristais: Fundamentos da Espectroscopia Vibracional. Porto Alegre: Bookman, 2009.

HARRIS, D. C.; BERTOLUCCI, M. D. Symmetry and spectroscopy: an introduction to vibrational and electronic spectroscopy. Mineola, New York: Dover Publications, 1989.

COTTON, F. A. Chemical applications of group theory. 3rd ed. New York: Wiley-Interscience, 1990.

SALA, O. Fundamentos da espectroscopia Raman e no infravermelho. São Paulo: UNESP, 1996.

NAKAMOTO, K. Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds. 6th ed. New York: John Wiley & Sons, 2009.

FERRARO, J. R.; BROWN, C. W.; NAKAMOTO, K. Introductory Raman spectroscopy. 2nd ed. London: Academic Press, 2002.

COLTHUP, N. B.; DALY, L. H.; WIBERLY, S. E. Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy. 2nd ed. New York: Academic Press, 1975.

FIGGIS, B. N.; HITCHMAN, M. A. Ligand field theory & its applications. New York: Wiley-VCH, 2000.

LEVER, A. B. P. Inorganic electronic spectroscopy. 2nd ed. Amsterdam: Elsevier, 1984.

SOLOMON, E. I.; LEVER, A. B. P. (Eds.) Inorganic electronic structure and spectroscopy. New York: Wiley-Interscience, 2006. v. 1: Methodology.

SOLOMON, E. I.; LEVER, A. B. P. (Eds.) Inorganic electronic structure and spectroscopy. New York: Wiley-Interscience, 2006. v. 2: Applications and case studies.

Curitiba, 09 de março de 2020

Prof. Dr. João Batista Marques Novo

Homepage: www.quimica.ufpr.br/jbm Novo

e-mail: jbm Novo@ufpr.br

QUIM7007 - Espectroscopia Vibracional e Eletrônica
CRONONOGRAMA DA 1ª PARTE: Teoria de Grupos, Simetria Molecular e Espectroscopia Vibracional
1º Semestre de 2020

Semana	CONTEÚDO
1	Apresentação do curso e critérios de avaliação Grupos: Propriedades, subgrupo, transformações de similaridade, classe; Simetria molecular: Operações e elementos de simetria em moléculas; Grupos de simetria: Grupos de simetria pontuais e projeção estereográfica;
1	Grupos de simetria: Classificação das moléculas em grupos de simetria pontuais; Representações matriciais das operações de simetria; Representações matriciais das operações de simetria reduzíveis e irreduzíveis; (introdução)
2	Grupos de simetria: Representações matriciais das operações de simetria reduzíveis e irreduzíveis; (continuação) Caracteres e tabelas de caracteres; (introdução)
2	Grupos de simetria: Caracteres e tabelas de caracteres; (continuação) Decomposição de representações reduzíveis e produto direto.
3	Espectro eletromagnético: Características. Espectroscopia Vibracional na região do Infravermelho (IV) e Raman Introdução: Fenômenos de absorção e espalhamento, origem molecular desses fenômenos, formato dos espectros vibracionais (IV e Raman) e instrumentação Moléculas diatômicas: Oscilador harmônico: funções de onda, níveis de energia vibracionais e relação com a constante de força das ligações e momento de dipolo molecular, regras de seleção e intensidades de bandas nos espectros vibracionais
3	Moléculas diatômicas: (continuação) Oscilador anarmônico: Potencial de Morse, constante de anarmonicidade, transições fundamental e sobretons Espectros roto-vibracionais: Ramos Q, P e R, O e S. Análise do espectro roto-vibracional do CO
4	Modos Normais de Vibração de Moléculas Poliatômicas: Modos normais de vibração, procedimento para se determinar a simetria dos modos normais. Exemplos: H ₂ O, XeF ₄ , BCl ₃ , CO ₂
4	Regras de Seleção (Atividade dos Modos Normais de Vibração no IV e Raman): Regras de seleção e polarização no IV e Raman: Relação entre a integral do momento de transição e a simetria dos modos normais de vibração. Distinção entre número de modos normais de vibração e número de bandas no espectro. Exemplos: N ₂ , CO, XeF ₄ , H ₂ O
5	Coordenadas de Simetria de Modos Vibracionais: Coordenadas de simetria e modos normais: procedimento para construção de coordenadas de simetria para modos vibracionais de estiramento e deformação. Exemplos: XeF ₄ e BCl ₃
5	Coordenadas de Simetria de Modos Vibracionais: (continuação) Coordenadas de simetria e modos normais (continuação)
6	Aplicação: Análise de Modos de Estiramento: Análise de modos de estiramento em diferentes compostos para determinação de número de bandas espectrais e distinção entre isômeros por meio de espectroscopia vibracional
6	Aplicação: Análise de Modos de Estiramento: (continuação) Aplicação: (continuação da aula anterior) Demonstração e estudo de modos vibracionais de diversas moléculas (visualização de animações de modos vibracionais por meio de mecânica-quântica, encontradas em diversos sítios da Internet).
7	Prova teórica

Obs: Cada semana tem 04 horas de aula teórica.

Horário para atendimento aos alunos: Terças e Sextas das 9:30h às 11:30hs, preferencialmente (no gabinete do Professor, ao lado da sala PQ17)