|  |  |
| --- | --- |
| color_1024x768 | **UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA****PROGRAMA DE DISCIPLINA** |

 DEPARTAMENTO:

|  |
| --- |
| **QUÍMICA** |

 IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| CÓDIGO | NOME (CARGA HORÁRIA - CRÉDITOS) | CARÁTER |
| **QMC1806** | **Fundamentos de Espectroscopia (45-3)** | **Obrigatória** |

 EMENTA:

|  |
| --- |
| Usar adequadamente as tabelas de caracteres e o conceito das coordenadas internas para o cálculo da representação irreduzível dos graus de liberdade vibracionais (bandas) dos principais modos de coordenação. Saber diferençar estiramentos, deformações, e suas principais variações. Conhecer a nomenclatura internacional para os símbolos usados em espectroscopia IV e Raman. Interpretar adequadamente os modelos vibracionais para as estruturas mais conhecidas. Entender a origem e uso dos desenhos Tanabe-Sugano, interpretar o espectro eletrônico usando termos espectroscópicos e determinar os parâmetros de Racah. Ter conhecimento da natureza de fluorescência e fosforescência. |

 PROGRAMA:

|  |
| --- |
| TÍTULO E DISCRIMINAÇÃO DAS UNIDADES |
| UNIDADE 1 – ELEMENTOS DE SIMETRIA E OPERAÇÕES DE SIMETRIA1.1 – Simetria de moléculas livres e de redes cristalinas moleculares1.2 – Correlação da simbologia de Schoenflies e Hermann-Mauguin1.3 – Multiplicação de operações e elementos de simetria1.4 - Grupos pontuais; Grupos pontuais cristalográficos e grupos espaciais1.5 – Propriedades de grupos e definições na teoria de grupos1.6 – Decréscimo de simetria e subgruposUNIDADE 2 – VETORES E MATRIZES: TABELAS DE CARACTERES2.1 – Representação vetorial dos graus de liberdade2.2 – Representação de operações de simetria em forma de matrizes2.3 – Montagem da Tabela de Caracteres e relações fundamentais 2.4 – Grupos pontuais degenerados; multiplicação de caracteres2.5 – Teoria da representação; a matriz rotacionalUNIDADE 3 – ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO E ESPECTROSCOPIA RAMAN3.1 – Atividade de vibrações; os modos normais de vibração3.2 – Vibrações IV ativas e momento dipolar3.3 – O Efeito Raman3.4 – O tensor de polarizabilidade3.5 – Espécies de simetria de vibrações Raman-ativasUNIDADE 4 – ANÁLISE VIBRACIONAL4.1 – Cálculo da representação reduzível da soma de todos os graus de liberdade4.2 – Coordenadas de deslocamento cartesiano4.3 – A matriz rotacional e representações redutíveis |

|  |
| --- |
| 4.4 – Representação redutível dos graus de liberdade vibracionais; fórmulas de redução4.5 – Cálculo da representação irredutível dos graus de liberdade vibracionais4.6 – Coordenadas internas como bases para matrizes vibracionais4.7 – Espectro vibracional de moléculas4.8 - Cálculo dos Estiramentos4.9 - O método da Simetria Local4.10 – Interpretação de espectros de infravermelho e RamanUNIDADE 5 – Espectroscopia fotoeletrônica5.1 – Transições eletrônicas5.2 – A serie espectroquímica5.3 – Regras de seleção5.4 – Termos espectroquímicos5.5 – Parâmetros de Racah5.6 – Diagramas de Orgel e de Tanabe-Sugano5.7 – Espectroscopia eletrônica por refletância difusa5.8 – Interpretação de espetros UV/Vis5.9 – Transferência de carga5.10 – Fluorescência e fosforescência |

BIBLIOGRAFIA:

|  |
| --- |
| BIBLIOGRAFIA BÁSICA E COMPLEMENTAR |
| BERSUCKER, I. B.; **Electronic Structure and Properties of Transition Metal Compounds: Introduction to the Theory**, 2nd Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2010.COLTHUP, N. B.; DALY, L. H.; WIBERLEY, S. E.; **Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy**, 3rd Ed., Academic Press, New York, 1990. KETTLE, S. F. A.; **Symmetry and Structure Readable Group Theory for Chemists**, 3rd Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2007.LARKIN, P.; **Infrared and Raman Spectroscopy; Principles and Spectral Interpretation**, Elsevier, Amsterdan, 2011. OLIVEIRA, G. N. M.; **Simetria de Moléculas e Cristais: Fundamentos da Espectroscopia Vibracional**, Bookmann, Porto Alegre, 2009.NAKAMOTO, K.; **Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, Theory and Applications in Inorganic Chemistry**, 6th Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2009.SALA, O.; **Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho**, 2ª Ed., Editora UNESP, São Paulo, 2008.SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W.; **Química Inorgânica**, 4ª Ed., Bookman, Porto Alegre, 2008.Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área. |
| Data: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Coordenador do Curso | Data: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Chefe do Departamento |