

QMC 866 - Disciplina de Métodos Instrumentais em Química Inorgânica
[90 horas/06 créditos]

Ementa da Disciplina:

Teoria de grupo e simetria molecular. Espectroscopia vibracional. Transição eletrônica. $^1\text{H-NMR}$.

Programa Detalhado:

I. Teoria de Grupo e Simetria Molecular:

Teoria de grupos pontuais - revisão: aplicação de axiomas, tabelas de multiplicação, grupos cíclicos, classes de simetria. Sistemática de grupos pontuais para moléculas: simbologia. Tipos de grupos: não-axiais, C, D, poliédricos, rotação. Decréscimo de simetria. Esquema para a classificação pontual de moléculas, Tabela de caracteres: Revisão. Vetores como graus de liberdade. Definição de grau de liberdade. Representação vetorial: coordenadas normais. Aplicações: moléculas angulares AB_2 , tetraédricas AB_4 - Simbologia de MULLIKEN: revisão. Formulário geral para caracteres de translação e de rotação: rotação de um ponto. Eixo de rotação. (C p) . Centro de inversão (i) , Plano especular (m) , Plano de rotação-reflexão (S p). Grupos pontuais cíclicos.

III. Espectroscopia Vibracional:

Atividade de Vibrações: vibrações Infravermelho-ativas e Raman-ativas. Princípio da seletividade. Análise de coordenadas normais: graus de liberdade: redução. Fórmula de redução, Coordenadas internas, Espectro vibracional de uma molécula AB_3 : pirâmidal e plana. Espectro de uma molécula AB_2 : angular, linear. Estiramento de valência CO em carbonilas metálicas, Espectro vibracional de uma molécula AB_6 octaédrica. Idem AB_4 tetraédrica. Decréscimo de simetria T_d e O_h Exemplos de espectros vibracionais para carbonilas metálicas. Estudo de modelos vibracionais de moléculas representativas e cálculos de espécies de simetria. Determinação de atividades IV e RAMAN. Interpretação de espectros selecionados.

IV. Transição Eletrônica:

Complexos octaédricos e tetraédricos: generalidades. íons $d^2 - d^8$ diagramas de níveis energéticos. A série espectroquímica. O espectro de Mn(II): observações quanto à largura e intensidade das bandas. Espectros de transferência de carga. Interpretação de um espectro: diagramas de Tanabe-Sugano e de Orgel.

V. $^1\text{H-NMR}$:

Generalidades. Constantes de acoplamento. Multiplicidade. Interpretação de espectros: ênfase na estrutura molecular de compostos inorgânicos,

LITERATURA:

1. J. M. Hollas "Symmetry in Molecules", Chapman and Hall, London, 1982.
2. K. Nakamoto "Infrared Spectra of Inorganic and Coordination Compounds", Wiley-Interscience Publication, New York, 1986.
3. N. B. Colthup, L. H. Daly, S. E. Wiberley,, "Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy", Academic Press, New York, 1990.
4. F. A. Cotton, G. Wilkinson,, "Advanced Inorganic Chemistry – A Comprehensive Text", John - Wiley & Sons, New York, 1992.
5. H. Günther, "NMR-Spektroskopie", Georg Thieme Verlag Stuttgart, New York, 1983.
6. I.-P. Lorenz, "Gruppentheorie und Molekülsymmetrie", Attempto Verlag, Tübingen, 1992.
7. G. Manzon de Oliveira, "Espectroscopia vibracional: sistemática para o cálculo dos estiramentos CO de complexos carbonílicos e determinação da sua atividade IV e RAMAN" *Química Nova*, 25 (2002) 648-656.