

Espectroscopia Molecular

Créditos: 04

Carga Horária: 60 horas

Ementa: Revisão da Teoria Quântica. Natureza da Radiação Eletromagnética: Descrição Clássica da Radiação Eletromagnética; Descrição Quântica da Radiação Eletromagnética. Teoria da Espectroscopia: Teoria de Perturbação Dependente do Tempo; Solução de Primeira Ordem da Equação de Schrodinger Dependente do Tempo; Transições Espectroscópicas; Regras de Seleção; Intensidades de Transição. Espectroscopia Rotacional. Espectroscopia Vibracional. Espectroscopia Atômica. Espectroscopia Eletrônica de Moléculas. Espectroscopia Fotoeletrônica.

Programa:

1. Revisão da Teoria Quântica

- Equação de Schrodinger;
- Interpretação da Função de Onda;
- Partícula na Caixa;
- Oscilador Harmônico;
- Átomo de Hidrogênio;
- Soluções Aproximadas para a Equação de Schrodinger;
- Princípio de Pauli;
- Momento Angular;
- Separação de Born-Oppenheimer.

2. Natureza da Radiação Eletromagnética

- Descrição Clássica da Radiação Eletromagnética;
- Descrição Quântica da Radiação Eletromagnética.

3. Teoria da Espectroscopia

- Teoria de Perturbação Dependente do Tempo;
- Solução de Primeira Ordem da Equação de Schrödinger Dependente do Tempo;
- Transições Espectroscópicas;
- Regras de Seleção e Intensidades de Transição.

4. Espectroscopia Rotacional

- Movimento Nuclear;
- O Hamiltoniano Rotacional;
- Função de Onda Rotacional;
- Regras de Seleção e o Espectro Rotacional;
- Distorção Centrífuga.

5. Espectroscopia Vibracional

- Função de Onda Vibracional;
- Modos Normais;
- Matrizes de Wilson;
- Regras de Seleção e o Espectro Vibracional;
- Anarmonicidade;
- Potencial de Morse;
- Superfície de Energia Potencial;

- Espectro Vibracional-Rotacional.

6. Espectroscopia Atômica

- Momento Angular;
- Acoplamento de Momento Angular;
- Espectro de Átomos Multi-Eletrônicos.

7. Espectroscopia Eletrônica de Moléculas

- Orbitais Moleculares;
- Estados Eletrônicos e Configurações Eletrônicas;
- Regras de Seleção e o Espectro Eletrônico;
- Estrutura Vibracional e Rotacional dos Estados Eletrônicos;
- Espectros Eletrônicos de Moléculas Poliatômicas;
- Princípio de Franck-Condon.

8. Espectroscopia Fotoeletrônica

- Processos de Ionização;
- Espectro Fotoeletrônico de Moléculas

Referências Bibliográficas:

- Levine, I. N., **Molecular Spectroscopy**, John Wiley & Sons, New York, 1975.
- Barrow, G. M., **Introduction to Molecular Spectroscopy**, McGraw-Hill Publishing Company, New York, 1962.
- Mchale, Jeanne L., **Molecular Spectroscopy**, Prentice Hall International Inc., New Jersey, 1999.
- Mueller, Michael, **Fundamentals of Quantum Chemistry Molecular Spectroscopy and Modern Electronic Structure Computations**, Kluwer Academic Publishers, New York, 2001.
- Hollas, J.M., **Modern spectroscopy**, 4^a ed., John Wiley & Sons, New York, 2004.
- Levine, I. N., **Quantum Chemistry**, Prentice-Hall International Inc., 4^a ed., New Jersey, 1991.
- Artigos recentes da literatura.