



FICHA DE COMPONENTE CURRICULAR

CÓDIGO:	COMPONENTE CURRICULAR: INTRODUÇÃO À ESPECTROSCOPIA	
UNIDADE ACADÊMICA OFERTANTE: INSTITUTO DE FÍSICA		SIGLA: INFIS
CH TOTAL TEÓRICA: 60	CH TOTAL PRÁTICA: 00	CH TOTAL: 60

OBJETIVOS

Habilitar o aluno a utilizar as propriedades básicas da estrutura atômica e molecular relacionando-as com sua interação com a radiação.

EMENTA

1.Estrutura atômica; 2.Estrutura molecular; 3.Simetria molecular; 4.Espectroscopia rotacional e vibracional; 5.Espectroscopia de transições eletrônicas. 6. Instrumentação em espectroscopia.

PROGRAMA

1. Estrutura Atômica

- 1.1 Estrutura de átomos hidrogenóides
- 1.2 Orbitais atômicos
- 1.3 Regras de seleção
- 1.4 Átomos de muitos elétrons e a aproximação orbital
- 1.5 Espectro de átomos complexos

2. Estrutura Molecular

- 2.1 A aproximação de Born-Oppenheimer
- 2.2 Teoria da ligação de valência
- 2.3 Teoria do orbital molecular
- 2.4 Moléculas poliatômicas
- 2.5 Orbitais moleculares para moléculas poliatômicas

3. Simetria Molecular

- 3.1. Operações e elementos de simetria

- 3.2. A classificação de simetria das moléculas
- 3.3 Tabela de caracteres
- 3.4 Integrais de superposição
- 3.5 Regras de seleção
- 3.6 Formulação matricial da polarização: Matrizes de Jones
- 3.7 Atividade óptica
- 3.8 Efeitos relacionados à polarização

4. Espectroscopia Rotacional e Vibracional

- 4.1 Introdução e aspectos gerais
- 4.2 Espectro rotacional puro
- 4.3 Vibração de moléculas diatômicas
- 4.4 Vibração de moléculas poliatômicas
- 4.5 Elementos de espectroscopia de absorção de infravermelho
- 4.6 Elementos de espectroscopia Raman

5. Espectroscopia De Transições Eletrônicas

- 5.1 Transições eletrônicas características
- 5.2 Processos fotofísicos moleculares
- 5.3 Probabilidade de transição e a força do oscilador
- 5.4 A lei de Beer-Lambert
- 5.5 O princípio de Franck-Condon
- 5.6 Processos de relação eletrônica
- 5.7 Fluorescência e fosforescência
- 5.8 Tempos de vida e eficiência quântica

6. Instrumentação Em Espectroscopia

- 6.1 Espectrógrafos e monocromadores
- 6.2 Técnicas interferométricas
- 6.3 Sistemas de detecção de luz

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

PAVIA, D.L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S.; VYVYAN, J. R. **Introdução à espectroscopia**. São Paulo: Cengage Learning, 2010.

ATKINS, P. W. **Physical chemistry**. Oxford: Oxford University Press, 1998.

DEMTRÖDER, W. **Laser spectroscopy**. New York: Springer, 2008.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

VALEUR, B. **Molecular fluorescence: principles and applications**. New York: Wiley-VCH, 2002.

BARROW, G. M. **Introduction to molecular spectroscopy**. New York: McGraw-Hill, 1962.

DEMTRÖDER, W. **Laser spectroscopy: basic concepts and instrumentation**. Berlin: Springer, 2003.

LAKOWICZ, J. R. **Principles of fluorescence spectroscopy**. New York: Springer, 2006.

MCHALE, J. L. **Molecular spectroscopy**. Upper Saddle River: Prentice Hall, 1999.

APROVAÇÃO

____/____/____

Carimbo e assinatura do Coordenador do Curso

____/____/____

Carimbo e assinatura do Diretor da
Unidade Acadêmica
(que oferece o componente curricular)