

Espectroscopia Aplicada a Compostos de Coordenação

Créditos: 04

Carga Horária: 60 horas

Ementa: Espectroscopia UV-Visível: Átomos Multieletrônicos e a Aproximação do Campo Central; Configurações Eletrônicas e Termos Espectroscópicos; Desdobramento dos Termos Espectroscópicos; Construção dos Diagramas de Correlação; Regras de seleção; Intensidades das Bandas; Acoplamento Vibrônico; Dicroísmo e Espectroscopia de Emissão. Espectroscopia Vibracional: Oscilador Harmônico; Vibração de Moléculas Poliatômicas; Os Modos Normais e as Matrizes F e G de Decius e Wilson; Construção dos Modos Normais adaptados à Simetria; Regras de Seleção; Espectroscopia Raman e Regras de Seleção; Aplicação da Espectroscopia Vibracional a Complexos.

Programa:

1. Espectroscopia UV-Visível

- Átomos Multieletrônicos e a Aproximação do Campo Central;
- Configurações Eletrônicas e Termos Espectroscópicos dos Íons Livres: Acoplamento Russell-Saunders e jj ;
- Desdobramento dos Termos Espectroscópicos em Campos de Simetria Octaédrica, Tetraédrica e Quadrado-Planar;
- Construção dos Diagramas de Correlação, de Orgel e de Tanabe-Sugano;
- Regras de Seleção, Intensidades das Bandas, Acoplamento Vibrônico, Dicroísmo e Espectroscopia de Emissão.

2. Espectroscopia Vibracional

- O Oscilador Harmônico e os Modos Normais de Vibração de Moléculas Poliatômicas;
- Os Modos Normais e as Matrizes F e G de Decius e Wilson;
- Construção dos Modos Normais adaptados à Simetria;
- Regras de Seleção e Modos Normais Ativos e Inativos no Infravermelho;
- Princípios Teóricos envolvidos na Espectroscopia Raman; Regras de Seleção e Modos Ativos e Inativos no Raman;
- Aplicação da Espectroscopia Vibracional à caracterização de Complexos: Carbonilas terminais e Carbonilas que formam pontes; Complexos de Nitrosilas e de Dinitrogênio.

Referências Bibliográficas:

- Lever A. B. P., **Inorganic Electronic Spectroscopy**, 2^a ed., Elsevier Science B. V., Amsterdam, 1984.
- Huheey J. E., Keiter E. A. e Keiter R. L., **Inorganic Chemistry (Principles of Structure and Reactivity)**, 4^a ed., Harper Collins, 1993.
- Cotton F. A. e Wilkinson G., **Advanced Inorganic Chemistry**, 5^a ed., John Wiley & Sons, New York, 1988.

- Figgis B. N., **Introduction to Ligand Fields**, John Wiley & Sons, New York, 1966.
- Cotton F. A., **Chemical Applications of Group Theory**, 3^a ed., John Wiley & Sons, New York, 1990.
- Nakamoto K., **Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds**, 4^a ed., John Wiley & Sons, New York, 1986.
- Harris D. C. e Bertolucci M. D., **Symmetry and Spectroscopy—An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy**, Dover Publications, New York, 1989.
- Artigos recentes da literatura.