



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE JUIZ DE FORA
212002 – ESPECTROSCOPIA MOLECULAR

CRÉDITOS: 04 (quatro) – 60 horas/aula

EMENTA: Introdução à espectroscopia vibracional: oscilador harmônico e anarmônico, energias clássica e quântica, modelos de vibração no infravermelho e Raman; Espectroscopia rotacional e rotovibracional; Introdução à teoria de grupos; Resolução da vibração molecular: campo de força e análise de coordenadas normais; Trabalho experimental de cálculo de coordenadas normais para sistemas químicos simples; Efeito Raman: modelo quântico de espalhamento de luz, efeitos especiais: Raman ressonante e intensificação de sinal por efeito de superfície.

PROGRAMA:

1. Introdução à espectroscopia vibracional: leis de Newton, equações de Lagrange, modelo quântico para frequência vibracional.
2. Oscilador harmônico e a aproximação do oscilador anarmônico: energia potencial de um sistema bola-mola e a aplicação ao modelo químico.
3. Introdução à espectroscopia no infravermelho: equações e principais aplicações.
4. Introdução à espectroscopia rotacional: modelos clássico e quântico, aplicações.
5. Análise de coordenadas normais: introdução e aplicação de teoria de grupos e grupos pontuais.
6. Análise de coordenadas normais: o problema da vibração molecular na análise de coordenadas normais; a equação secular.
7. Experimental: cálculo de coordenadas normais de sistema químico simples (de poucos átomos).
8. Efeitos Raman especiais: Raman ressonante.
9. Efeitos Raman especiais: intensificação do sinal Raman por efeito de superfície (SERS).

BIBLIOGRAFIA:

1. McHALE, Jeanne L. Molecular Spectroscopy. Prentice-Hall, USA, 1999.
2. SALA, Oswaldo. Fundamentos da Espectroscopia RAMAN e no Infravermelho. 2.ed. Editora da UNESP, Brasil, 2008.
3. HARRIS, Daniel C.; BERTOLUCCI, Michael D. Symmetry and spectroscopy: an introduction to vibrational and electronic spectroscopy. Dover Publications, USA, 1999.
4. COLTHUP, Norman B.; DALY, Lawrence H.; WIBERLEY, Stephen E. Introduction to Infrared and RAMAN Spectroscopy. 3.ed. Academic Press, USA, 1990.

Prof. Dr. Renato Camargo Matos
Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Química
Universidade Federal de Juiz de Fora



Documento assinado eletronicamente por **Renato Camargo Matos, Coordenador(a)**, em 25/11/2022, às 18:11, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no Portal do SEI-Ufjf (www2.ufjf.br/SEI) através do ícone Conferência de Documentos, informando o código verificador **1006859** e o código CRC **DB8A7051**.
