



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS**  
**DEPARTAMENTO DE QUÍMICA**

Campus Universitário-Trindade - 88040-900 - Florianópolis - SC - Brasil  
Fone: (048) 3721-6852 - Fax: +55 48 3721 6852 - E-mail: secretar@qmc.ufsc.br

---

**DISCIPLINA: QUÍMICA INORGÂNICA TEÓRICA III**

**CÓDIGO: QMC 5140**

**CARGA HORÁRIA: 36 HORAS/AULA**

**CURSO: Química**

**EMENTA**

Introdução à teoria de grupo, com aplicações à espectroscopia vibracional e eletrônica. Teoria dos orbitais moleculares.

**P R O G R A M A**

I) Teoria de Grupo: noção e propriedades de grupos, simetria, operações de simetria, grupos pontuais, tabela de caracteres.

II) Aplicações à Espectroscopia Vibracional: determinação de modos ativos no Raman e no Infravermelho, determinação da simetria molecular pela análise dos espectros vibracionais, integral do momento de transição vibracional, análise de transições vibracionais.

III) Aplicações à Espectroscopia Eletrônica: integral do momento de transição eletrônica, regras de seleção, relaxação das regras de seleção. Transições vibrônicas e transições d-d. Introdução ao Efeito Raman Ressonante.

IV) Teoria dos Orbitais Moleculares: conceitos básicos, moléculas diatômicas. Tratamento por Teoria de Grupo: algoritmo de Van Vleck, moléculas triatômicas, diborano, moléculas cíclicas planares, compostos de coordenação. Conceito de estados ou termos espectroscópicos. Transições eletrônicas em O.M. . Transições de transferência de carga e intervalência.

## BIBLIOGRAFIA

- 1) Livro-texto: B.Douglas, D.McDaniel e J.Alexander: Concepts and Models of Inorganic Chemistry, 3<sup>a</sup> ed., John Wiley & Sons, N.Y. (1994).
- 2) J.E.Huheey: Inorganic Chemistry, Harper and Row, 3<sup>a</sup> ed., N.Y. (1983).
- 3) F.A.Cotton e G.Wilkinson, Advanced Inorganic Chemistry, 3<sup>a</sup> ed., J.W. & Sons, N.Y.
- 4) F.A.Cotton, Chemical Applications of Group Theory, 2<sup>a</sup> ed., J. W. & Sons, N.Y. (1971).
- 5) L.H.Hall, Group Theory and Symmetry in Chemistry, McGraw-Hill, 1969.
- 6) R. M. Hochstrasser, Molecular Aspects of Symmetry, W.A.Benjamin, 1966.
- 7) J.Michael Hollas, Modern Spectroscopy, John Wiley, 1987.
- 8) G.Herzberg, Infrared and Raman Spectra, Van Nostrand, 1945.
- 9) Kazuo Nakamoto, Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, John Wiley, 1985.
- 10) S.F.A.Kettle, Symmetry and Structure, John Wiley, 1985.
- 11) P.W.Atkins, Physical Chemistry ou Molecular Quantum Mechanics, Oxford University Press, 1987.
- 12) Oswaldo Sala, Fundamentos e Aplicações da Espectroscopia Raman e no Infravermelho, Editora da Unesp, 1996.