



## 1. Disciplina

02167P - Espectroscopia e Difratometria Avançadas

Professor Responsável: Juliano Rosa de Menezes Vicenti

Nível: Mestrado e Doutorado

Carga horária: 45 horas

Créditos: 03

Caráter: Eletivo

Duração: Semestral

Área de concentração: Físico-Química

Lotação: Escola de Química e Alimentos da FURG

## 2. Ementa

**Espectroscopia vibracional avançada: Raman e infravermelho.** Momento de dipolo e polarizabilidade. Vetores e tensores. Simetria e tabelas de caracteres. Análise de modos normais de vibração. Atividade de espécies de simetria no Raman e no infravermelho. **Espectroscopia eletrônica avançada.** Transições eletrônicas. Orbitais, microestados e tipos de acoplamentos. Termos espectroscópicos e desdobramentos de energia. Diagramas de correlação. Interpretação de espectros UV-Vis. **Difração de raios-X avançada.** Estruturas cristalinas e amorfas. Ondulatória. Pontos, planos e direções cristalográficas. Indexação de difratogramas. Redes espaciais de Bravais. Ausências gerais e sistemáticas. Fatores estruturais. Densidade eletrônica. Refinamento de dados.

## 3. Bibliografia Básica

1. G. M. de OLIVEIRA. *Simetria de moléculas e cristais: fundamentos da espectroscopia vibracional*. Bookman, 2009, Porto Alegre, 269 p.
2. MIESSLER, G. L.; FISCHER, P. J.; TARR, D. A. *Química Inorgânica*. 5ª Ed. Pearson, 2014, São Paulo, 649 p.
3. SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X. *Spectroscopic Identification of Organic Compounds*. 6ª Ed. Wiley, 1998.
4. ATKINS, P.; de PAULA, J. *Physical Chemistry*. 9ª Ed. Oxford University Press, 2010, Great Britain, 1010 p.
5. CLEARFIELD, A.; REIBENSPIES, J. H.; BHUVANESH, N. *Principles and Applications of Powder Diffraction*. 1<sup>st</sup> Ed., Wiley, 2008, 386 p.



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE**  
**ESCOLA DE QUÍMICA E ALIMENTOS**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA TECNOLÓGICA E AMBIENTAL**

---

6. WASEDA, Y.; MATSUBARA, E.; SHINODA, K. *X-Ray Diffraction Crystallography*. Springer, 2011, 310 p.
7. T. HAHN; *International Tables of Crystallography*, Vol. A (1987), Space Group Symmetry, 2<sup>nd</sup> Ed., The International Union of Crystallography, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holland.
8. MÜLLER, P.; HERBST-IRMER, R.; SPEK, A. L.; SCHNEIDER, T. R.; SAWAYA, M. R. *Crystal Structure Refinement: A Crystallographer's Guide to SHELXL*. Oxford University Press, 2006, 213 p.
9. R. J. D. TILLEY; *Crystals and Crystal Structures*. John Wiley & Sons Ltd., 2006, 255 p.
10. DINNEBIER, R. E.; BILLINGE, S. J. L. *Powder Diffraction: Theory and Practice*. The Royal Society of Chemistry, 2008, 582 p.