

Espectroscopia Molecular

Ocorrência: 3º semestre

Carga horária: TP 45h; OT 7.5h

ECTS: 5,5

Área disciplinar: Química

Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes):

Esta UC tem como objetivo aprofundar os conceitos de ligação química nas suas várias abordagens e ocorrências, apresentando também as várias técnicas espectroscópicas como ferramentas para observar as propriedades de átomos, moléculas e ligações. Esta UC irá expandir alguns dos temas introduzidos na UC "Química Geral". A ligação química será explorada como uma extensão natural das propriedades dos átomos, incluindo-se aqui uma abordagem computacional inicial. Uma introdução à termodinâmica como guia do estabelecimento de ligações atômicas e moleculares está também incluída. As espectroscopias de absorção serão apresentadas em estreita relação com as características estruturais por elas elucidadas; a espectrometria de massa e a ressonância magnética nuclear serão mostradas como ferramentas analíticas estruturais mas também em correlação com as espectroscopias de absorção e em paralelo com as abordagens computacionais habitualmente utilizadas para resolver e modelar estruturas.

Conteúdos programáticos:

1. Átomos e estrutura molecular. Ligação química como partilha de electrões. Electronegatividade e ligações polares. Ligação metálica
2. Teoria de Repulsão dos Pares Electrónicos de Valência; Teoria das Orbitais Moleculares; Teoria da Ligação de Valência. Deslocalização, ressonância e hibridização
3. Geometria molecular. Simetria e desvios da simetria

- 4. Interações intermoleculares - interações electrostáticas e ligações de hidrogénio
- 5. Introdução à termodinâmica - entalpia, entropia e energia de Gibbs na interacção de átomos e de moléculas
- 6. Espectroscopia como consequência da estrutura - electrões, átomos e moléculas como fontes de sinais espectroscópicos.
 - 6.1 Espectroscopia de ultravioleta-visível
 - 6.2 Fluorescência e fosforescência
 - 6.3A espectroscopia de infravermelho - vibração de ligações e elucidação estrutural
 - 6.4A ressonância magnética nuclear e a espectrometria de massa como ferramentas de elucidação estrutural
 - 6.5. Difracção de raios-X para análise de cristais

Bibliografia principal:

- Dias, A.R., Ligação Química, Instituto Superior Técnico, ISBN 978-9-728-46949-8.
- Salema, M., Exercícios sobre Ligação Química, Instituto Superior Técnico, ISBN 978-9-728-46993-1.
- Lampman, G.M., Pavia, D.L., Introduction to Spectroscopy – International Edition, Brooks Cole, ISBN 978- 0-538-73418-9.
- Atkins, P., de Paula, J., Elements of Physical Chemistry, OUP Oxford, ISBN 978-0-199-60811-9.
- Chang, R., Physical Chemistry for the Biosciences, University Science Books, ISBN 978-1-891-38933-7