

SUMÁRIO

| | |
|--|----|
| Apresentação..... | 13 |
| 1. Conceitos Introdutórios | 17 |
| 1.1 Vibrações Harmônicas em Molécula Isolada | 17 |
| 1.2 Oscilador Harmônico Amortecido | 20 |
| 1.3 Rotação de Molécula Isolada e na Fase Líquida | 24 |
| 2. Desvio de Frequência Vibracional | 29 |
| 2.1 Momentos de um Contorno de Banda..... | 29 |
| 2.2 Anarmonicidade em Molécula Isolada..... | 32 |
| 2.3 Desvio de Frequência Vibracional do Oscilador Anarmônico..... | 33 |
| 2.4 Teoria Quântica do Desvio de Frequência Vibracional .. | 39 |
| 2.5 Desvio de Frequência Vibracional de Molécula Poliatômica | 43 |
| 3. Desvio de Frequência Vibracional e Propriedades Dielétricas do Líquido | 47 |
| 3.1 Polarizabilidade e Índice de Refração | 47 |

| | | |
|-----|---|-----|
| 3.2 | Índice de Refração e Constante Dielétrica | 51 |
| 3.3 | Desvio de Frequência Vibracional e Propriedades Dielétricas | 54 |
| 3.4 | Intensidade de Absorção no Infravermelho e Propriedades Dielétricas..... | 58 |
| 4. | Forças Intermoleculares | 67 |
| 4.1 | Expansão em Multipolos | 67 |
| 4.2 | Teoria de Perturbação e Forças Intermoleculares | 70 |
| 4.3 | Desvio de Frequência Vibracional e Interações Não Específicas..... | 73 |
| 4.4 | Desvio de Frequência Vibracional e Interações Específicas..... | 79 |
| 4.5 | Ligação de Hidrogênio | 85 |
| 5. | Estrutura de Líquidos | 95 |
| 5.1 | Fundamentos de Mecânica Estatística Clássica..... | 96 |
| 5.2 | Funções de Distribuição e Estrutura de Líquidos..... | 99 |
| 5.3 | Desvio de Frequência Vibracional e Estrutura de Líquidos | 103 |
| 5.4 | Simulação Computacional de Líquidos..... | 112 |
| 6. | Formalismo do Tempo da Espectroscopia | 123 |
| 6.1 | Regra de Ouro de Fermi | 124 |
| 6.2 | Formalismo do Tempo..... | 129 |
| 6.3 | Função de Correlação no Tempo..... | 132 |
| 6.4 | Cálculo de Funções de Correlação no Tempo por Simulação de Dinâmica Molecular | 141 |
| 6.5 | Funções de Correlação no Tempo e Espectroscopia Vibracional..... | 143 |
| 7. | Relaxação Reorientacional e Vibracional | 149 |
| 7.1 | Relaxação Reorientacional | 150 |
| 7.2 | Relaxação da Fase Vibracional | 155 |
| 7.3 | Representações em Mecânica Quântica | 170 |
| 7.4 | Limitações da Análise de Forma de Banda e Espectroscopia Vibracional com Resolução Temporal ... | 179 |

| | |
|---|-----|
| 8. Efeitos Induzidos por Interações Moleculares | 191 |
| 9. Efeito de Não Coincidência Raman | 205 |
| 10. Considerações Finais: Modos Normais de Vibração em Líquidos..... | 215 |
| Referências Bibliográficas | 223 |
| Sobre o Autor | 253 |