

Caracterização da disciplina

Código disciplina:	da	NHT4007.14	Nome disciplina:	da	Espectroscopia			
Créditos (T-P-I):	(4-2-6)	Carga horária:	72 horas	Aula prática:		Câmpus:	SA	
Código da turma:		Turma:		Turno:		Quadrimestre:	Ano:	
Docente(s) responsável(is):		Hueder Paulo Moisés de Oliveira						

Alocação da turma

	Segunda	Terça	Quarta	Quinta	Sexta	Sábado
8:00 - 9:00						
9:00 - 10:00						
10:00 - 11:00						
11:00 - 12:00						
12:00 - 13:00						
13:00 - 14:00						
14:00 - 15:00						
15:00 - 16:00						
16:00 - 17:00						
17:00 - 18:00						
18:00 - 19:00						
19:00 - 20:00						
20:00 - 21:00						
21:00 - 22:00						
22:00 - 23:00						

Planejamento da disciplina
Objetivos gerais

O objetivo desta disciplina é apresentar ao aluno os conceitos fundamentais das principais teorias e técnicas envolvidas em espectroscopia.

Objetivos específicos

Os objetivos específicos desta disciplina são apresentar ao aluno os fundamentos e teorias que embasam as principais técnicas espectroscópicas disponíveis, e mostrar princípios básicos de instrumentação em espectroscopia moderna.

Ementa

Mecânica-quântica e espectroscopia; Interação da radiação eletromagnética com a matéria; Equação de Schrödinger dependente do tempo; Coeficientes de Einstein; Aproximação de Born-Oppenheimer; Absorção e emissão de radiação; Intensidades de linhas espectrais; Instrumentação básica em espectroscopia; Espectroscopia rotacional; Espectroscopia vibracional; Espectroscopia Raman; Regras de seleção em espectroscopia; Espectroscopia eletrônica; Excitação eletrônica e progressão vibracional; Princípio de Franck-Condon; Relaxação eletrônica: fluorescência e fosforescência; LASER; Princípios básicos das Espectroscopias: RMN, EPR. Fundamentos básicos e aplicações de radiação síncrotron.

Conteúdo programático

Aula	Conteúdo	Estratégias didáticas	Avaliação
T1	Introdução e tópicos do curso. Radiação eletromagnética e propriedades.	Aula expositiva	Conteúdo avaliado na prova 1
T2	Histórico da Espectroscopia. Princípios de Mecânica Quântica (revisão).	Aula expositiva com participação dos alunos	Conteúdo avaliado na prova 1
T3	Teoria da interação da radiação com a matéria. Teoria de perturbação dependente do tempo. Coeficientes de Einstein absorção/emissão.	Aula expositiva com participação dos alunos	Conteúdo avaliado na prova 1
T4	Espectroscopia de Absorção. Lei de Beer-Lambert. Fluorescência e fosforescência. Largura de linhas de transições e fatores de alargamento.	Aula expositiva com participação dos alunos	Conteúdo avaliado na prova 1
T5	Fundamentos de espectroscopia molecular. Graus de liberdade. Movimentos translacional, rotacional e vibracional. Aproximação de Born-Oppenheimer. Curvas de energia potencial.	Aula expositiva com participação dos alunos	Conteúdo avaliado na prova 1
T6	Rotação molecular e classificação de rotores. Espectro do rotor não-rígido. Regras de seleção para espectro rotacional e rotação-	Aula expositiva com participação dos alunos	Conteúdo avaliado na prova 1

	vibração. Efeito de substituição isotópica. Efeito Stark no espectro rotacional. Modos normais de vibração. Tratamento das vibrações - Oscilador harmônico.			
T7	Espectro vibracional. Regra de seleção vibracional. Espectro vibracional. Transições vibracional-rotacional.	Aula expositiva com participação dos alunos		Conteúdo avaliado na prova 1
T8	Fundamentos da espectroscopia Raman. Espalhamento de radiação. Comparação entre processos de espalhamento elástico e inelástico. Espectro Raman e regras de seleção.	Aula expositiva com participação dos alunos		Conteúdo avaliado na prova 1
T9	Fundamentos de espectroscopia eletrônica I: - Átomos. Soluções da equação de Schrödinger. Momentos angulares. Símbolo do termo. Espectro atômico. Regras de seleção transições atômicas.	Aula expositiva com participação dos alunos		Conteúdo avaliado na prova 1
T10	Fundamentos de espectroscopia eletrônica II: - Moléculas. Diatômicas. Tratamento mecânico quântico da Teoria da ligação de valência e da Teoria dos orbitais moleculares. Espectros eletrônicos. Regras de seleção (átomos e moléculas). Princípio de Franck-Condon. Estrutura vibracional e progressões no espectro eletrônico.	Aula expositiva com participação dos alunos		Conteúdo avaliado na prova 2
T11	Classificação dos termos eletrônicos de moléculas. Simetria e grupos de ponto moleculares. Processos de excitação eletrônica, relaxação, ionização, dissociação em moléculas. Espectroscopias de fotoelétrons, Espectrometria de massas. Fontes de radiação (UV,R-X), LASER, radiação síncrotron.	Aula expositiva com participação dos alunos		Conteúdo avaliado na prova 2
T12	Caracterização de partículas- Bósons e férmions. Espectroscopia de ressonância de spin. Interação entre spin e um campo magnético	Aula expositiva com participação dos alunos		Conteúdo avaliado na prova 2

	aplicado.		
T13	Ressonância magnética nuclear (RMN).	Aula expositiva com participação dos alunos	Conteúdo avaliado na prova 2
T14	Ressonância Paramagnética de elétrons (EPR).	Aula expositiva com participação dos alunos	Conteúdo avaliado na prova 2
T15	Espectroscopia Mossbauer	Aula expositiva com participação dos alunos	Conteúdo avaliado na prova 2
P1	Apresentação das práticas e das regras do laboratório	Aula prática de laboratório e discussão. Discussão dos experimentos com os alunos	
P2	PRÁTICA 1: Determinação de parâmetros espectroscópicos de uma amostra de I ₂	Aula prática de laboratório e discussão. Discussão dos experimentos com os alunos	
P3	PRÁTICA 2: Determinação de parâmetros espectroscópicos de uma amostra de corante.	Aula prática de laboratório e discussão. Discussão dos experimentos com os alunos	Entrega de relatório.
P4	PRÁTICA 3: Determinação de rendimento quântico de emissão	Aula prática de laboratório e discussão. Discussão dos experimentos com os alunos	Entrega de relatório.
P5	PRÁTICA 4: Determinação de polaridade de sítio de solubilização	Aula prática de laboratório e discussão. Discussão dos experimentos com os alunos	Entrega de relatório.
P6	PRÁTICA 5: Efeito do ambiente químico sobre o espectro de absorção e fluorescência de uma amostra de corante catiônico	Aula prática de laboratório e discussão. Discussão dos experimentos com os alunos	Entrega de relatório.
P7	PRÁTICA 6: Análise Espectroscópica do Ácido Maléico e Fumárico	Aula prática de laboratório e discussão. Discussão dos experimentos com os alunos	Entrega de relatório.
P8	PRÁTICA 7: Análise Espectroscópica do Clorofórmio e Tetracloreto de Carbono	Aula prática de laboratório e discussão. Discussão dos experimentos com os alunos	Entrega de relatório.

P9	PRÁTICA 8: Análise Vibracional dos Compostos Ácido Maléico e Fumárico: Uma abordagem de Teoria de Grupos e Simetria	Aula prática de laboratório e discussão. Discussão dos experimentos com os alunos	Entrega de relatório.
P10	PRÁTICA 9: Análise Vibracional dos Compostos Clorofórmio e Tetracloreto de Carbono	Aula prática de laboratório e discussão. Discussão dos experimentos com os alunos	Entrega de relatório.

Descrição dos instrumentos e critérios de avaliação qualitativa

Nesta disciplina a avaliação do rendimento do aluno será realizada em função do seu aproveitamento em provas teóricas, práticas, entre outros, conforme definido pelo docente. A modalidade e pesos de cada avaliação serão determinados pelo docente, levando em consideração as particularidades dos conteúdos trabalhados.

Os conceitos a serem atribuídos aos estudantes não deverão estar rigidamente relacionados a qualquer nota numérica de provas, trabalhos ou exercícios. Os resultados também considerarão a capacidade do aluno de utilizar os conceitos e material das disciplinas, criatividade, originalidade, clareza de apresentação e participação em sala de aula e laboratórios. O aluno será informado sobre as normas e critérios de avaliação que serão considerados ao se iniciar a disciplina.

Referências bibliográficas básicas

1. ATKINS, Peter. Físico-química. 9 ed., Rio de Janeiro, LTC, 2012. vol. 1 e 2.
2. HOLLAS, J.M. Modern Spectroscopy. 4a ed. New Jersey: Wiley Inc, 2004.
3. D.L. PAVIA, G.M. LAMPMAN, G.S. KRIZ, *Introdução à Espectroscopia*, tradução 5th Edition . (versão em Inglês também disponível).
4. D.W. Ball , *Físico-química*, Vols. 1 e 2 .
5. LEE J. D., Química Inorgânica Não Tão Concisa. São Paulo: Edgard Blucher. 1999
6. HARRIS, D.C.; BERTOLUCCI, M.D. Symmetry and spectroscopy: an introduction to vibrational and electronic spectroscopy. New York: Dover Publications, 1989.

Referências bibliográficas complementares

1. MCQUARRIE, D.A; SIMON, J.D. Physical chemistry: a molecular approach. Sausalito, EUA: University Science Books 1997. 1360 p.
2. BANWELL, C. N. Fundamentals of molecular spectroscopy. 1a ed. McGraw-Hill, 1966.
3. ALBRIGHT, T. A. Orbital Interactions in Chemistry. 2a ed. Wiley-Interscience. 2002.
4. CARTER, R.L. Molecular symmetry and group theory. New York: J. Wiley, 1998.
5. I.N. Levine, *Quantum chemistry*. 6th edition.