

**Caracterização da disciplina**

Código da disciplina:	NHT4007-15	Nome da disciplina:	Espectroscopia						
Créditos (T-P-I):	(4-2-6)	Carga horária:	72 horas	Aula prática:		Câmpus:	SA		
Código da turma:		Turma:		Turno:	Diurno/Noturno	Quadrimestre:	3	Ano:	2018
Docente(s) responsável(is):	Alexsandre Figueiredo Lago								

**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 discente os conceitos e princípios fundamentais das principais teorias e técnicas envolvidas em espectroscopia.

**Objetivos específicos**

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

**Ementa**

Radiação eletromagnética e sua interação com a matéria; Fontes de LASER e radiação síncrotron. Equação de Schrödinger dependente do tempo; Coeficientes de Einstein; Absorção e emissão de radiação; fluorescência e fosforescência; Intensidades de linhas espectrais; Instrumentação básica em espectroscopia;

Espectroscopia rotacional; Espectroscopia vibracional; Espectroscopia Raman; Espectroscopia eletrônica (átomos e moléculas); Aproximação de Born-Oppenheimer; Princípio de Franck-Condon; Regras de seleção em espectroscopia; Princípios básicos de Espectrometria de Massas e Espectroscopia RMN.

**Conteúdo programático**

Aula	Conteúdo	Estratégias didáticas	Avaliação
T1	Tópicos do curso. Introdução à Espectroscopia.	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	Radiação eletromagnética e propriedades: Principais fontes de radiação usadas em espectroscopia, LASER, radiação síncrotron.	Aula expositiva com participação dos alunos	Conteúdo avaliado na prova 1
T4	Teorias da interação da radiação com a matéria, e perturbação dependente do tempo. Coeficientes de Einstein absorção/emissão.	Aula expositiva com participação dos alunos	Conteúdo avaliado na prova 1
T5	Espectroscopia de Absorção emissão. Lei de Beer-Lambert. Fluorescência e fosforescência (fundamentos).	Aula expositiva com participação dos alunos	Conteúdo avaliado na prova 1
T6	Larguras de linhas de transições e fatores de alargamento. Graus de liberdade em moléculas e partição de energia (translacional ,	Aula expositiva com participação dos alunos	Conteúdo avaliado na prova 1

	rotacional, vibracional, eletrônico).			
T7	Rotação molecular e classificação de rotores. Espectro do rotor não-rígido. Regras de seleção para espectro rotacional e rotação-vibração.	Aula expositiva com participação dos alunos		Conteúdo avaliado na prova 1
T8	Efeito de substituição isotópica. Efeito Stark no espectro rotacional.	Aula expositiva com participação dos alunos		Conteúdo avaliado na prova 1
T9	Fundamentos da espectroscopia Raman. Espectro Raman e regras de seleção	Aula expositiva com participação dos alunos		Conteúdo avaliado na prova 1
T10	Modos normais de vibração. Tratamento das vibrações - Oscilador harmônico e anarmonicidade. Espectro vibracional. Regra de seleção vibracional. Espectro vibracional.	Aula expositiva com participação dos alunos		Conteúdo avaliado na prova 2
T11	Transições vibracional-rotacional. Regras de seleção espectro vibracional.	Aula expositiva com participação dos alunos		Conteúdo avaliado na prova 2
T12	Fundamentos de espectroscopia eletrônica I: - Átomos. Soluções da equação de Schrödinger. Momentos angulares. Símbolos do termo. Espectro atômico. Regras de seleção em transições atômicas.	Aula expositiva com participação dos alunos		Conteúdo avaliado na prova 2
T13	Fundamentos de espectroscopia eletrônica II: - Moléculas. Diatômicas. Tratamento mecânico quântico da Teoria da ligação de valência e da Teoria dos orbitais moleculares. Aproximação de Born-Oppenheimer. Curvas de energia potencial. Princípio de Franck-Condon.	Aula expositiva com participação dos alunos		Conteúdo avaliado na prova 2

T14	Espectros eletrônicos em moléculas. Regras de seleção (moléculas). Classificação dos termos eletrônicos de moléculas (e uso de simetria). Processos de excitação eletrônica, relaxação, ionização, dissociação em moléculas. Espectroscopia de fotoelétrons (UPS e XPS).	Aula expositiva com participação dos alunos	Conteúdo avaliado na prova 2
T15	Espectrometria de massas. Ressonância Magnética Nuclear (RMN) .	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: Espectroscopia de absorção UV-VIS em moléculas (parte 1)	Aula prática de laboratório e discussão. Discussão dos experimentos com os alunos	
P3	PRÁTICA 2: Espectroscopia de absorção UV-VIS em moléculas (parte 2)	Aula prática de laboratório e discussão. Discussão dos experimentos com os alunos	
P4	PRÁTICA 3: Determinação de parâmetros espectroscópicos de corantes (parte 1)	Aula prática de laboratório e discussão. Discussão dos experimentos com os alunos	Entrega de relatório.
P5	PRÁTICA 4: Determinação de parâmetros espectroscópicos de corantes (parte 2)	Aula prática de laboratório e discussão. Discussão dos experimentos com os alunos	
P6	PRÁTICA 5: Análise vibracional do Clorofórmio e Tetracloreto de Carbono (parte 1)	Aula prática de laboratório e discussão. Discussão dos experimentos com os alunos	Entrega de relatório.
P7	PRÁTICA 6: Análise vibracional do Clorofórmio e Tetracloreto de Carbono (parte 2)	Aula prática de laboratório e discussão. Discussão dos experimentos com os alunos	
P8	PRÁTICA 8: Análise Vibracional dos Compostos Ácido Maléico e Fumárico	Aula prática de laboratório e discussão. Discussão dos experimentos com os alunos	Entrega de relatório.

P9	Avaliações		
P10	Resultados		

**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, relatórios, listas de exercícios, 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 poderão não estar rigidamente relacionados a qualquer nota numérica de provas, trabalhos ou exercícios, ficando a critério do docente.

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. J. M. Hollas, *Modern Spectroscopy*, 4th Edition, Wiley, 2004.
2. D. L. Pavia, G.M. Lampman, G.S. Kriz, *Introdução à Espectroscopia*, tradução da 5th Edition, Cengage Learning, 2016. (versão em Inglês também disponível).
3. D. C. Harris, M. D. Bertolucci, *Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy*, Dover, 1989.
4. D. A. McQuarrie.; J.D. Simon, *Physical chemistry: a molecular approach*, University Science Books, 1997.
5. P. Atkins, *Físico-química.*, Vols. 1 e 2, 9ª edição, LTC, 2012.
6. A. M. Ellis, et al., *Electronic and photoelectron spectroscopy : fundamentals and case studies*, Cambridge, 2005.

**Referências bibliográficas complementares**

1. I. N. Levine, *Quantum chemistry*. 6<sup>th</sup> edition, Pearson, 2009.
2. C. N. Banwel, E.M. MacCash, *Fundamentals of molecular Spectroscopy*, 4<sup>th</sup> Edition.
3. - G. Margaritondo, *Elements of Synchrotron Light: For Biology, Chemistry, and Medical Research*.
4. J.I. Steinfeld, *Molecules and Radiation, an introduction to modern molecular spectroscopy*, 2<sup>nd</sup> Edition, Dover, 2005.