

DISCIPLINA(PPEF0011):		TÉCNICAS DE ESPECTROSCOPIA FÍSICA			
OBRIGATORIA () SIM (X) NÃO	CARGA HORÁRIA				CRÉDITOS 4
	TEÓRICA 60	PRÁTICA -	EAD/SEMIPRESENCIAL -	TOTAL 60	
PRÉ-REQUISITO: SEM PRÉ-REQUISITO					
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: (X) OPTOELETRÔNICA (X) MATERIAIS					
NÍVEL: MESTRADO					
EMENTA: Introdução a várias técnicas espectroscópicas, imprescindíveis para a caracterização de materiais modernos, bem como na correlação estrutural-funcional dos mesmos. Técnicas: Espectroscopia na região do infravermelho, espectroscopia Raman, Espectroscopia eletrônica, ressonância paramagnética eletrônica (EPR), Ressonância magnética nuclear (RMN), Espectroscopia Mössbauer.					
CONTEÚDO PROGRAMÁTICO: - Introdução Geral à Espectroscopia: Definição e objetivos, Ondas eletromagnéticas, matéria; Tipos de interação (espalhamento, absorção, emissão), teoria eletromagnética clássica, teoria mecânico-quântica; Observáveis espectroscópicos; origens e conteúdos informacionais. - Fundações da Teoria dos Grupos: Operações de simetria, grupos, teoria das representações; Teorema de ortogonalidade, tabelas de caracteres; Conceitos teóricos de espectroscopia em relação a teoria de grupos. - Espectroscopia Vibracional: Vibrações moleculares, oscilador harmônico e anarmônico; Descrição teórica de vibrações moleculares na teoria dos grupos; Espectroscopia de absorção do infravermelho: Fundamentos físicos, probabilidades de transição em relação à teoria dos grupos, bandas da combinação e de overtone; Estrutura rotacional dos espectros vibracionais; Aspectos experimentais e aplicações; Espectroscopia Raman: Princípios físicos, descrição teórica de probabilidades de transição, efeitos de polarização - Espectroscopia Eletrônica: Estrutura eletrônica, átomos hidrogenóides, átomos multi-eletrônicos, acoplamento spin-orbita, símbolos espectroscópicos; Teoria de campo de cristais, aspectos da teoria de grupos, diagramas de Tanabe-Sugano, espectros eletrônicos, acoplamento vibrônico; Propriedades espectroscópicas dos metais da transição e das terras raras; Aspectos experimentais, espectroscopia de luminescência, medições fotofísicas; Espectroscopia de raios-X: fundamentos, aspectos experimentais e aplicações - Ressonância Paramagnética Eletrônica (RPE): Grupos duplos e seus significado na espectroscopia RPE; Fundamentos físicos, interação Zeeman, zero-fieldsplitting, interações hiperfinas, aspectos de estado sólido; Aplicações aos radicais livres, aos metais da transição e aos de terras raras; Aspectos experimentais de RPE de onda contínua e pulsada - Ressonância Magnética Nuclear (RMN): Fundamentos físicos, observáveis experimentais (frequências e tempos da relaxação); Técnicas experimentais de RMN pulsada, teoria semi-clássica; Interações locais (blindagem magnética, acoplamento dipolar, acoplamento quadrupolar; Experimentos de selectiveaveraging, espectroscopia bi-dimensional; Efeitos de dinâmica (motionnarrowing) - Espectroscopia Mössbauer: Fundamentos físicos e aspectos experimentais; Interações locais e aplicações em estudos estruturais					
BIBLIOGRAFIA BÁSICA: 1- ATKINS, PW. FRIEDMAN, RS. Molecular Quantum Mechanics, OUP Oxford, 2011. 2- J. J. C. Teixeira Dias, Espectroscopia molecular, Fundação Calouste Gulbenkian, 1986. 3- P. Atkins, Físico-química., Vol. 1 e 2, LTC, 8ª edição, 2008. 4- J. M. Hollas, Modern Spectroscopy, WileyBlackwell; 4th Edition, 2003. 5- J. M. Hollas, Basic Atomic and Molecular Spectroscopy, Royal Society of Chemistry, 2002. 6- C.N. Banwel, E.M. MacCash, Fundamentals of molecular Spectroscopy, McGraw-Hill Higher Education; 4 edition 1994.					

7- D. C. Harris, M. D. Bertolucci , Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy, Dover, 1990.

8- D.A. McQuarrie.; J.D. Simon, Physical chemistry: a molecular approach, University Science Books,U.S. 1997.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR:

1. I.N. Levine, Physical chemistry, McGraw-Hill Higher Education; 5 edition , 2001J.
2. J. C. Teixeira Dias, Espectroscopia molecular, Fundação Calouste Gulbenkian, 1986.
3. P. Atkins, Físico-química., Vol. 1 e 2, LTC, 8ª edição, 2008.
4. J. M. Hollas, Modern Spectroscopy, WileyBlackwell; 4th Edition, 2003.
5. J. M. Hollas, Basic Atomic and Molecular Spectroscopy, Royal Society of Chemistry, 2002.
6. C.N. Banwel, E.M. MacCash, Fundamentals of molecular Spectroscopy, McGraw-Hill Higher Education; 4 edition 1994.
7. D. C. Harris, M. D. Bertolucci , Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy, Dover, 1990.