



## PLANO DE ENSINO

**Unidade Universitária:** Escola de Engenharia**Programa de Pós-Graduação:** Engenharia de Materiais e Nanotecnologia**Curso:** Mestrado Acadêmico     Mestrado Profissional     Doutorado**Disciplina:**

Métodos Espectroscópicos Avançados

**Código:**

ENST52526

**Professor:**

Carga horária:	Créditos	
48	4	<input type="checkbox"/> Obrigatória <input checked="" type="checkbox"/> Optativa <input type="checkbox"/> Eletiva

**Ementa:**

A disciplina trata do estudo dos fundamentos teóricos e aplicações das técnicas espectroscópicas e espectrométricas. Os itens abordados são os seguintes: espectroscopia no infravermelho, espectroscopia Raman, espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios X, espectroscopia no UV-Vis, espectrometria de massas.

**Conteúdo Programático:****1 - Espectroscopia no Infravermelho:**

Princípio da técnica. Transformada de Fourier. Procedimentos de preparo de amostras. Interpretação dos espectros. Aplicações práticas.

**2 - Espectroscopia Raman:**

Princípio do método. Procedimentos de preparo de amostras. Interpretação dos espectros. Aplicações práticas.

**3 - Espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios X:**

Determinação de energias de ligação em sólidos e líquidos, estudo de superfícies, identificação de elementos, instrumentação, manuseio da amostra, interpretação dos espectros, Áreas de aplicação

**4 - Espectroscopia no UV-Vis:**

Fundamentos da técnica; relação entre absorção e concentração: Lei de Lambert-Beer; espectros de absorção; instrumentação espectrofotométrica; desvios da Lei de Lambert-Beer. Aplicações práticas.

**5- Espectrometria de massas:**

Fundamentos da técnica: massas nominais e exatas (fórmula molecular), regras (do nitrogênio, de Stevenson), resolução, padrões isotópicos, íons moleculares e fragmentações principais, e detecção.

Princípios e aplicações das principais técnicas de ionização: EI, ESI, MALDI, APCI, APPI e técnicas de ionização ambientais: DESI, DART, EASI.

Princípios e aplicações dos principais analisadores de massas: quadrupolos, ion traps, TOFs e orbitraps.



Uso da técnica em química aplicada como em ciências ôhmicas, forense, novos materiais, produtos naturais, combustíveis, alimentos.

### Critério de Avaliação:

- I - A – excelente: corresponde às notas no intervalo entre os graus 9 e 10;
- II - B – bom: corresponde às notas no intervalo entre os graus 8 e 8,9;
- III - C – regular: corresponde às notas no intervalo entre os graus 7 e 7,9;
- IV - R – reprovado: corresponde às notas no intervalo entre os graus 0 e 6,9.

### Bibliografia:

#### Bibliografia Básica

DOMIN, M.; CODY, R. **Ambient Ionization Mass Spectrometry (New Developments in Mass Spectrometry)**. 1st Edition, Royal Society of Chemistry, 2015.

McHALE, J.L.. **Molecular Spectroscopy**. CRC Press; 2017.

LAMBERT, J.B.; MAZZOLA, E.B.; RIDGE,C.D. **Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy: An Introduction to Principles, Applications, and Experimental Methods**. UK, Wiley, 2019

SKOOG, D. A.; HOLLER, F. J., NIEMAN, T. A., **Princípios de Análise Instrumental**, 6<sup>a</sup> edição, Bookman: São Paulo, 2009.

#### Bibliografia Complementar

WATSON, J. THROCK; SPARKMAN, O. DAVID. **Introduction to Mass Spectrometry: Instrumentation, Applications, and Strategies for Data Interpretation**, UK, Wiley 2007.  
Artigos científicos recentes.

SALA, O. **Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho - 2<sup>a</sup> Edição**, Editora UNESP, 2008.

HOFFMANN, EDMOND; STROOBANT, VINCENT. **Mass Spectrometry: Principles and Applications**, 3rd EditioN, UK, Wiley 2007.

WATTS, JOHN F.; WOLSTENHOLME, JOHN. **An introduction to surface analysis by XPS and AES**. UK, Wiley 2009.