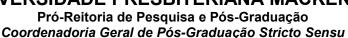


### UNIVERSIDADE PRESBITERIANA MACKENZIE





#### **PLANO DE ENSINO**

Unidade Universitária: Escola de Engenharia				
Programa de Pós-G	<b>Fraduação:</b> Engenha	aria de Materiais e Na	notecnologia	
Curso:	☐ Mestrado Profissiona	al ⊠ Doutorado		
Disciplina: Métodos Espectroscópicos Avançados			Código:	
Professor(es): Prof. Dr.				
Carga horária: 48	Créditos 4	□ Obrigatória ⊠ Optativa □ Eletiva		
Ementa:		I		

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.



## UNIVERSIDADE PRESBITERIANA MACKENZIE

Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação Coordenadoria Geral de Pós-Graduação Stricto Sensu



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:

Segundo Regulamento Geral da Pós-Graduação Stricto Sensu, Art. 98, "Será considerado aprovado o aluno que obtiver, em cada disciplina obrigatória, optativa e nas atividades programadas o conceito final "A", "B" ou "C", conforme relação de conceitos a seguir:

- 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**, 6ª 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 - 2ª 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.