# LOM3247 - Técnicas de Análises Espectroscópicas

#### **Techniques for Spectroscopic Analysis**

Créditos-aula: 4 Créditos-trabalho: 0 Carga horária: 60 h Semestre ideal: 9 Ativação: 01/01/2012

Departamento: Engenharia de Materiais

### **Objetivos**

Fornecer ao estudante uma introdução às técnicas de espectroscopia utilizadas na física da matéria condensada, na físico-química e na biofísica.

### Docente(s) Responsável(eis)

519033 - Carlos Yujiro Shigue

### Programa resumido

Espectroscopia de Microondas. Espectroscopia Vibracional: Infravermelho e Raman. Espectroscopia Eletrônica. Ressonância Magnética Nuclear. Ressonância Paramagnética Eletrônica. Espectroscopia Mössbauer.

## Programa

Espectro Eletromagnético. Níveis de energia em átomos e moléculas. Estrutura de bandas em sólidos. Transições. Regras de seleção.

Espectroscopia de Microondas. Espectros rotacionais. Determinação de momentos dipolares. Espectro de inversão (NH3).

Elementos de Simetria e Teoria de Grupos. Operações de simetria. Espécies de simetria. Tabelas de caracteres.

Espectroscopia Vibracional : Infravermelho e Raman. Espectroscopia vibracional de moléculas. Propriedades ópticas dos sólidos.. Semicondutores: gap de energia. Éxcitons. Espectroscopia Raman em cristais. Espectroscopia de absorção em cristais iônicos.

Espectroscopia Eletrônica. Espectros eletrônicos moleculares e regras de seleção. Elementos de campo cristalino. Espectros de absorção de complexos de metais de transição. Centros de cor. Luminescência.

O fenômeno de ressonância magnética. Ressonância Magnética Nuclear: espectros, relaxação e espectroscopia de alta resolução.

Ressonância Paramagnética Eletrônica: espectros hiperfinos; espectros de íons metálicos; Hamiltoniano de Spin.

Espectroscopia Mössbauer.

#### Avaliação

Método: Aulas expositivas e práticas ministradas em laboratório.

Critério: Média ponderada de duas provas escritas, trabalhos e relatórios: P1, P2 e TR. Conceito

Final = (P1 + 2P2 + TR)/4

**Norma de recuperação:** Média ponderada de duas provas escritas, trabalhos e relatórios: P1, P2 e TR. Conceito Final = (P1 + 2P2 + TR)/4

### **Bibliografia**

ATKINS, P. W.; FRIEDMAN, R. S. Molecular Quantum Mechanics, Oxford University Press, 1997.

DEMTRÖDER, W. Molecular Physics, Wiley-VCH, 2006.

HAKEN, H.; WOLF, H. C. Molecular Physics and Elements of Quantum Mechanics, Springer, 2010

HOLLAS, J. M. Modern Spectroscopy, Wiley, 1992.

HARRIS, D. C.; BERTOLUCCI, M. D. Symmetry and Spectroscopy, Dover, 1978.

McHALE, J. L. Molecular Spectroscopy, Prentice Hall, 1998.

PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S.; VYVYAN, J. A. Introduction to Spectroscopy, Brooks Cole, 2008.

WEIL, J. A.; BOLTON, J. R. Electron Paramagnetic Resonance: Elementary Theory and Practical Applications, Wiley-Interscience, 2007.

DICKSON, D. P. E.; BERRY, F. J. Mössbauer Spectroscopy, Cambridge University Press, 2005.

INGLE Jr., J. D.; CROUCH, S. R. Spectrochemical Analysis, Prentice Hall, New Jersey, 1988.

LEVER, A. B. P. Inorganic Electronic Spectroscopy, Elsevier Science, New York, 1984.