

CCMN			
Instituto de Química			
Código	MS-085	Setorização Definitiva	Espectroscopia
Conteúdo Programático	<p>I) PARTE GERAL</p> <p>1- Leis da Termodinâmica. Trabalho, Calor, Energia Interna e Entalpia. Termoquímica. Entropia, energia livre de Helmholtz e energia livre de Gibbs;</p> <p>2- Equilíbrio de fases para substâncias puras e multicomponentes. Diagramas de fases;</p> <p>3- Termodinâmica das misturas e soluções. Grandezas parciais molares. Potencial químico. Soluções ideais e não ideais. Propriedades coligativas;</p> <p>4- Postulados da Mecânica Quântica e aplicações aos problemas com solução exata: partícula na caixa unidimensional, oscilador harmônico e rotor rígido;</p> <p>II) PARTE ESPECÍFICA</p> <p>5- Interação da luz com a matéria. Coeficientes de Einstein, Força do Oscilador e Efeito Spin-Órbita: Conceituação teórica e métodos experimentais de determinação;</p> <p>6- Espectroscopia de Fotoabsorção: Lei de Lambert-Beer. NEXAFS e EXAFS: Fundamentos e métodos experimentais. Medidas de rendimento eletrônico e do rendimento de fluorescência. Emprego da luz síncrotron;</p> <p>7- Espectroscopia de Fotoelétrons nas regiões do ultravioleta (UPS) e raios-X (XPS). Fundamentos teóricos e metodologia experimental. Emprego de fontes de luz convencionais e da luz síncrotron. Determinações quantitativas;</p> <p>8- Excitação e ionização de elétrons de camadas internas. Estrutura fina vibracional. Processo Auger. Fragmentação iônica de moléculas. Dessorção iônica. Emprego de técnicas de espectrometria de massas. Uso de feixes de elétrons e da luz síncrotron;</p> <p>9-Fluorescência de raios-X: Fundamentos teóricos e metodologia experimental. Emprego de fontes de luz convencionais e da luz síncrotron. Análise quantitativa;</p> <p>10- Luz síncrotron: fundamentos, propriedades e aplicações.</p>		
Bibliografia	<p>1) Físico-Química, Volumes 1 e 2. LTC Editora (8ª edição, 2006), P. Atkins, J. de Paula;</p> <p>2) Physical Chemistry. McGraw Hill (5ª edição, 2002), I. N. Levine;</p> <p>3) Quantum Chemistry, I. N. Levine, Prentice Hall;</p> <p>4) NEXAFS Spectroscopy, J. Stöhr, Springer Verlag, Heidelberg (1992).</p> <p>5) An Introduction to Surface Analysis by XPS and AES, J.F. Watts, J. Wolstenholme, John Wiley and Sons Ltd, Chichester (2003).</p> <p>6) Modern Techniques of Surface Science, D. P. Woodruff and T. A. Delchar, Cambridge University Press, Solid State Science Series (1999).</p> <p>7) X-Ray Fluorescence Spectrometry and Related Techniques. An Introduction, Eva Margui and René Van Grieken, Momentum Press (2013), e livros análogos.</p> <p>8) Electronic and Nuclear Relaxation of Core-Excited Molecules, I. Nenner and P. Morin, Cap. 9, VUV and Soft X-Ray Photoionization. Ed. by U. Becker and D. A. Shirley. Plenum Press, New York (1996); Catalin Miron and Paul Morin, Handbook of High-Resolution Spectroscopy, Edited by Martin Quack and Frederic Merkt. 2011, John Wiley & Sons Ltd.;</p> <p>9) Ernst-Eckhard Koch, Handbook on Synchrotron Radiation, vol. 11. North-Holland Publishing Company, 1983.</p>		