	UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA			
	FICHA DE DISCIPLINA			
DISCIPLINA:	**TÓPICOS ESPECIAIS EM ENGENHARIA QUÍMICA: ESPECTROSCOPIA DE ABSORÇÃO DE RAIOS-X**			
PERÍODO:	CURSO: Pós-Graduação em Engenharia Química		FACULDADE DE ENG. QUÍMICA	
Código: PEQ031B	Carga Horária 60	Créditos 04	Obrigatória ☐	Optativa ☑

REQUISITOS (Disciplinas pré ou có-requisitos, n. de créditos, outros):

OBJETIVOS DA DISCIPLINA

Ao final do curso o pós-graduando deverá ser capaz de:

1) Aplicar a técnica de Espectroscopia de Absorção de Raios X (XAS, *X-Ray Absorption Spectroscopy*) no estudo de propriedades eletrônicas e estruturais de catalisadores metálicos suportados;
2) Utilizar a infra-estrutura disponível no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS) para obtenção de dados de XAS. Neste sentido, o aluno aprenderá a:
   a) Preparar amostras na forma de pastilha ou capilar e inseri-las nos fornos apropriados para a condução dos experimentos de XAS;
   b) Planejar e montar experimentos de XAS nas linhas de luz DXAS, XAFS1 e XAFS2 do LNLS, e operar a instrumentação existente nas instalações.
3) Realizar o tratamento dos dados obtidos em modo dispersivo (linha DXAS) e em modo varredura (linhas XAFS1 e XAFS2). No caso dos dados obtidos em modo varredura, serão analisadas as regiões de XANES (*X-Ray Absorption Near Edge Structure*) e de EXAFS (*X-Ray Absorption Fine Structure*), dando ênfase em todas as variáveis que caracterizam um espectro de EXAFS, ou seja, número de coordenação, distância de ligação, fator de Debye-Waller e energia de ligação. O tratamento dos dados será realizado com os softwares livres Athena e Artemis em interface com o software livre IFEFFIT;
4) Utilizar os dados tratados para estimar a possível formação de ligas metálicas e tamanho de partículas metálicas.

EMENTA DO PROGRAMA

O curso tem a finalidade de atender à necessidade da introdução dos conceitos relacionados à aplicação das técnicas de espectroscopia de absorção de raios X para a caracterização de catalisadores metálicos. A meta principal do curso é propiciar aos alunos a familiaridade com os conceitos básicos associados à espectroscopia de absorção de raios X, assim como com suas aplicações em catalisadores metálicos.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

STÖHR, J. **NEXAFS Spectroscopy**. Springer Series in Surface Sciences, vol. 25, 1992, 403 p.

NIEMANTSVERDRIET, J.W. **Spectroscopy in Catalysis**. 3ª Ed. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, vol. 1, 2007.

KONINGSBERGER, D.C.; RAMAKER, D.E. **Applications of X-ray Absorption Spectroscopy in Heterogeneous Catalysis: EXAFS, Atomic XAFS, and Delta XANES**. Handbook of Heterogeneous Catalysis. vol. 3, 2008, p. 774–803.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

ÁVILA NETO, C.N. **Sobre a estabilidade de catalisadores de cobalto suportados durante a reforma do etanol.** 2009. 169 f. Tese (Doutorado em engenharia química) - Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2012.

DATA 09/12/2013	DATA 09/12/2013

DESCRIÇÃO DO PROGRAMA

I. Introdução

1. Processos envolvidos na iteração da radiação eletromagnética com a matéria;
2. Introdução fenomenológica à espectroscopia de absorção de raios X;
3. Abordagem teórica dos espectros de XANES (*X-ray Absorption Near Edge Structure*) e EXAFS (*Extended X-ray Absorption Fine Structure*);

II. Experimentos de absorção de raios X

1. Descrição das linhas de luz DXAS, XAFS1 e XAFS2;
2. Sistemas reacionais utilizados nas linhas de luz;
3. Preparação das amostras: pastilhas e capilares
4. Tipos de experimentos
   4.1. XANES *in situ* com resolução na temperatura
   4.2. XANES *in situ* com resolução espacial
   4.3. EXAFS in situ

III. Tratamento de dados

1. Normalização, calibração e formas de apresentação dos espectros: gráficos tipo cascata e contorno
2. Combinação linear de espectros de XANES
3. Tratamento de dados de EXAFS
   3.1. Transformação de energia do fóton (E) para módulo do vetor de onda do fotoelétron (k)
   3.2. Obtenção das oscilações de EXAFS, $\chi(k)$
   3.3. Ajuste de $\chi(k)$ à equação de EXAFS
   3.4. Modelos para o fator de Debye-Waller
4. Interpretação dos dados de XANES e EXAFS a partir de estudos de casos
5. Métodos para estimar a formação de ligas metálicas
6. Modelagem de tamanho e estrutura de partículas a partir de dados de EXAFS