Tópico: Pós-Graduação/Graduação UFMG 2026

Título:

Introdução a Ressonância Paramagnética Eletrônica (EPR) – Conceitos e Aplicações

Professores Responsáveis:

Prof. Henrique Fernandes Vieira Victória (UNIFEI), Prof. Klaus Krambrock (UFMG)

Carga Horária:

Semanal: 4 horas Total: 60 horas Turno: Diurno

Pré-requisitos:

Física Quântica I

Número Máximo de Alunos:

25

Forma de Avaliação:

Exercícios, apresentações e prova escrita.

Ementa:

Interação magnética – Ressonância paramagnética eletrônica – EPR de um ensemble de spins – Forma de linha e relaxação – Espectrômetro de EPR – Técnicas avançadas – EPR em líquidos e sólidos – Aplicações: Terapia fotodinâmica (PDT); (Foto)catálise (PCAT); Defeitos em materiais semicondutores.

Objetivo:

Fundamentar conceitos basilares para a técnica de Ressonância Paramagnética Eletrônica e destacar a sua importância em diversas áreas da ciência aplicada.

Metodologia:

As aulas serão expositivas com uso de quadro e apresentações, concomitante com a utilização do laboratório de Ressonância Magnética. Para cada conteúdo da disciplina haverá uma indicação de bibliografia e lista de exercícios.

Conteúdo:

- Interações magnética: efeito Zeeman, interação hiperfina, interação fina, Hamiltoniano de spin, Teoria de perturbação independente do tempo
- Ressonância paramagnética eletrônica, Teoria de perturbação dependente do tempo
- Amostras paramagnéticas diluídas: líquidos/sólidos, tempos de relaxação spin-rede e spin-spin, distribuição Boltzmann

- Forma de linha: magnetização, equações de Bloch, susceptibilidade magnética
- Relaxação de spin: movimento Browniano, tempo de correlação, equações de Bloch modificadas, tensores de g e A
- Espectrômetro de EPR: Ponte de micro-ondas, modulação, lock-in, CAF, detecção de sinal, parâmetros experimentais
- Técnicas avançadas de ressonância magnética: NMR, ENDOR, ODMR, EPR pulsada
- EPR em líquidos: marcadores e sondas de spin, armadilhas de spin
- EPR em sistemas de Terapia Fotodinâmica: Cruzamento intersistema, fotossensibilizadores, processos tipo I e II, detecção de oxigênio singleto
- EPR em sistemas de fotocatálise heterogênea: semicondutores, defeitos, catálise e
 fotocatálise, eletrocatálise, piezocatálise, aplicações em despoluição ambiental e
 geração de energia limpa, detecção de espécies reativas de oxigênio e outros, cinética e
 mecanismos de reação.

Bibliografia:

- 1. CARRINGTON, Alan; MCLACHLAN, Andrew D. Introduction to magnetic resonance, with applications to chemistry and chemical physics. Harper & Row, New York, 1969.
- 2. BERLINER, Lawrence J.; REUBEN, Jacques (Ed.). Spin labeling: theory and applications. Springer Science & Business Media, 2012.
- 3. WEIL, John A.; BOLTON, James R. Electron paramagnetic resonance: elementary theory and practical applications. John Wiley & Sons, 2007.

Bibliografia complementar:

- 1. SPAETH, Johann-Martin; OVERHOF, Harald. Point defects in semiconductors and insulators: determination of atomic and electronic structure from paramagnetic hyperfine interactions. Springer Science & Business Media, 2013.
- 2. DOUGHERTY, Thomas J. et al. Photodynamic therapy. Journal of National Cancer Institute, v. 90, n. 12, p. 889-905, 1998.
- 3. SCHLÖGL, Robert. Heterogeneous catalysis. Angewandte Chemie International Edition, v. 54, n. 11, p. 3465-3520, 2015.
- 4. JANZEN, Edward G. Spin trapping. Accounts of Chemical Research, v. 4, n. 1, p. 31-40, 1971.
- 5. MOAN, Johan; WOLD, Einar. Detection of singlet oxygen production by ESR. Nature, 279, 5712, 450-451, 1979.
- 6. VICTÓRIA, Henrique FV et al. Detection of singlet oxygen by EPR: The instability of the nitroxyl radicals. Free Radical Biology and Medicine, v. 180, p. 143-152, 2022.