

SEI/UFU - 2831581 - Ficha de Componente Curricular



Ficha de Componente Curricular

CÓDIGO: PQ116	COMPONENTE CURRICULAR: Métodos Físicos em Química Inorgânica	
UNIDADE ACADÊMICA OFERTANTE: Programa de Pós-Graduação em Química	SIGLA: PPGQUI	
CH TOTAL TEÓRICA: 60 horas	CH TOTAL PRÁTICA: 00 horas	CH TOTAL: 60 horas
CATEGORIA: Optativa	CURSO(S): Mestrado e Doutorado	

OBJETIVOS

Introduzir os fundamentos das técnicas de caracterização essenciais nos estudos de compostos inorgânicos: RMN, UV-vis, IV, Raman, espectrometria de massas, análise térmica (TG/DSC), difração de raios X de pó e de monocristal e microscopias eletrônicas (MEV e MET). Preparar amostras e interpretar os resultados obtidos. Discutir as aplicações das técnicas de caracterização em Química Inorgânica.

Ementa

Ressonância Magnética Nuclear aplicada a compostos inorgânicos.

Espectroscopia Eletrônica no Ultravioleta e Visível aplicada a compostos de coordenação. Espectroscopia Vibracional no Infravermelho aplicada a compostos inorgânicos. Espectroscopia Raman aplicada a compostos inorgânicos. Análise térmica aplicada a compostos de coordenação. Espectrometria de massas aplicada a compostos inorgânicos. Difração de raios X de pó e de monocristal aplicada a compostos inorgânicos. Microscopia eletrônica aplicada a compostos inorgânicos.

PROGRAMA

1. Ressonância magnética nuclear (RMN) aplicada a compostos inorgânicos

1.1. Fundamentos da espectroscopia de ressonância magnética nuclear.

1.2. Determinação estrutural em química inorgânica utilizando RMN de ^1H , ^{13}C , ^{31}P e ^{195}Pt .

2. Espectroscopia eletrônica no Ultravioleta e visível (UV-VIS) aplicada a compostos de coordenação

2.1. Bandas de transferência de carga.

2.2. Transições de campo ligante, regras de seleção e intensidade das bandas.

2.3. Diagramas Tanabe-Sugano.

3. Espectroscopia vibracional no Infravermelho (IV) aplicada a compostos inorgânicos

3.1. Fundamentos da técnica de IV.

3.2. Preparação das amostras.

3.3. Análise dos espectros de compostos inorgânicos.

4. Espectroscopia Raman aplicada a compostos inorgânicos

4.1. Fundamentos da técnica de espectroscopia Raman.

4.2. Análise dos espectros de compostos inorgânicos.

4.3. Aplicações da técnica na identificação de compostos inorgânicos.

5. Espectrometria de Massas

5.1. Fundamentos da técnica de espectrometria de Massas.

5.2. Análise de compostos inorgânicos: ESI-MS, MALDI-MS.

5.3. Aplicações da técnica na caracterização de compostos inorgânicos e na determinação de interação de compostos inorgânicos com biomoléculas/alvos terapêuticos.

6. Difração de raios X em monocristal

6.1. Fundamentos da técnica de difração de raios X de monocristal.

6.2. Métodos de cristalização para obtenção de cristais.

6.3. Tratamento de dados utilizando o programa WingX.

7. Análise térmica e suas aplicações em química de coordenação

7.1. A técnica TG/DSC - características gerais.

7.2. Fatores que afetam a reprodutibilidade de uma curva termogravimétrica.

7.3. Aplicações em química de coordenação.

8. Difração de raios X de pó aplicada a sólidos inorgânicos

6.1. Fundamentos da técnica difração de raios X de pó.

6.2. Preparação das amostras.

6.3. Análise dos difratogramas.

9. Microscopia eletrônica.

9.1. Fundamentos da técnica de microscopia eletrônica.

9.2. Microscopia eletrônica de varredura (MEV e FEG): análise das imagens obtidas.

9.3. Microscopia eletrônica de transmissão (MET): análise das imagens obtidas.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

1. BLASSE, G.; GRABMAIER, B. C. Luminescent Materials. 1a. ed. Spring, 1994.

2. EBSWORTH, E.A.V.; RANKIN, D.W.H.; CRADOCK, S. Structural Methods in Inorganic Chemistry. 2a. ed. Blackwell Scientific, 1991.

3. IGGO, J. A. NMR Spectroscopy in Inorganic Chemistry. Oxford: Oxford University Press, 1999.

4. HAINES, P. J. Principles of Thermal Analysis and Calorimetry. The Royal Society of Chemistry RSC, Cambridge, 2002.

5. HAMMOND, C. The basics of crystallography and diffraction. 2a. ed. Oxford: Oxford University Press, International Union of Crystallography, 2001.

6. HENDERSON, W.; MCINDOE, J. S. Mass Spectrometry of Inorganic Coordination and Organometallic Compounds: Tools Techniques Tips. Wiley & Sons, 2005. ISBN: 9780470850152

7. KITAI, A. Luminescent Materials and Applications. Chichester; Hoboken: John Wiley, c2008. ix, 278 p., il. (some col.), 26 cm. (Wiley series in materials for electronic and optoelectronic applications). Inclui bibliografia e índice. ISBN 9780470058183 (enc.).
8. LEVER, A. B. P. Inorganic Electronic Spectroscopy. 2a. ed. Amsterdam: Elsevier, 1984; 2nd repr. 1997.
9. MOTHÉ, C. G.; AZEVEDO, A. D. Análise Térmica de Materiais. São Paulo: Artliber, 2009.
10. NAKAMOTO, K. Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds. 5a ed. John Wiley & Sons, 1996.
11. OLIVEIRA, M. G. Simetria de moléculas e cristais: Fundamentos da espectroscopia vibracional. 1a. ed. Bookman, 2009.
12. RUSSEL, D.H. Experimental Mass Spectrometry. Springer, 1994. ISBN: 978-1-4899-2569-5
13. SALA, O. Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho. 2a. ed. Araraquara: Unesp, 2012.
14. SILVERSTEIN, R.M.; WEBSTER, F.C.; KIEMLE, D.J.; BRYCE, D.L. Spectrometric Identification of Organic Compounds. Wiley & Sons, 2014. ISBN: 978-0-470-61637-6
15. WENDLANDT, W. W. Thermal Analysis, 3. ed. New York: John Wiley & Sons, 1986.
16. WENDLANDT, W. W.; SMITH, J. P. Thermal Properties of Transition-Metal Complexes, New York: John Willey & Sons, 1967.
17. ZELEWSKI, A. VON. Stereochemistry of coordination compounds. New York: Wiley, 1996.

18. Artigos e revisões pertinentes, publicados em periódicos nacionais e internacionais.

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

1. COLTHUP, N. B.; DALY, L. H.; WIBERLEY, S. E. Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy. 3a. ed. New York: Academic Press, 1990.
2. FARIAS, R. F. Química de Coordenação: Fundamentos e atualidades, 1a. ed. Campinas: Átomo, 2005.
3. HARRIS, D. C.; BERTOLUCCI, M. D. Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy. New York: Dover, 1989. ISBN: 9780486661445
4. LARKIN, P. Infrared and Raman Spectroscopy: Principles and Spectral Interpretation. 1a. ed. Elsevier, 2011.
5. SMITH, B. Infrared Spectral Interpretation: A Systematic Approach. Boca Raton: CRC Press, 1999.

aprovação

Rodrigo Alejandro Abarza Muñoz	Fábio Augusto do Amaral
Coordenador do PPGQUI	Diretor do IQUFU

	Documento assinado eletronicamente por Rodrigo Alejandro Abarza Muñoz, Coordenador(a) , em 02/07/2021, às 15:32, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015 .
---	---

	A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0 , informando o código verificador 2831581 e o código CRC 818EDBD6 .
---	--

Referência: Processo nº
23117.036831/2021-41

SEI nº 2831581