



**TÓPICOS ESPECIAIS EM QUÍMICA:
MÉTODOS FÍSICOS EM QUÍMICA INORGÂNICA**

Código: PQ516

Área de Concentração: Química

Carga Horária: 60h

Créditos: 4

Responsáveis: Carolina Gonçalves Oliveira, Edson Nossol, Fernando Rodrigues Goulart Bergamini, Renata Cristina de Lima, Wendell Guerra

Objetivos:

Introduzir os fundamentos das técnicas de caracterização essenciais no estudo 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:

- 1- WENDLANDT, W. W. *Thermal Analysis*, 3. ed., New York, John Wiley & Sons, 1986.
- 2- WENDLANDT, W. W. & SMITH, J. P. *Thermal Properties of Transition-Metal Complexes*, John Willey & Sons, New York, 1967.
- 3- MOTHÉ, C. G. & AZEVEDO, A. D. *Análise Térmica de Materiais*, Editico Com. Ltda., São Paulo, 2002.
- 4- Zelewski, A. Von. *Stereochemistry of coordination compounds*, New York: Wiley, 1996.
- 5- HAINES, P. J. *Principles of Thermal Analysis and Calorimetry*, The Royal Society of Chemistry RSC, Cambridge, 2002.
- 6- IGGO, J. A. *NMR Spectroscopy in Inorganic Chemistry*. Oxford: Oxford University Press, 1999.
- 7- EBSWORTH, E.A.V., RANKIN, D.W.H., CRADOCK, S. *Structural Methods in Inorganic Chemistry*, 2a ed. Blackwell Scientific, 1991.
- 8- LEVER, A. B. P. *Inorganic Electronic Spectroscopy*. 2nd ed. Amsterdam: Elsevier, 1984; 2nd repr. 1997.
- 9- K. Nakamoto. *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds*, 5a ed. John Wiley & Sons, 1996.
- 10- SALA, O. *Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho*. 2ª ed. Editora Unesp. 2012.
- 11- OLIVEIRA, M. G. *Simetria de moléculas e cristais: Fundamentos da espectroscopia vibracional*. 1ª ed. Bookman, 2009.



- 12- HAMMOND, C. *The basics of crystallography and diffraction*. 2nd ed. Oxford: Oxford University Press, International Union of Crystallography, 2001.
- 13- BLASSE, G., GRABMAIER, B.C. *Luminescent Materials*. 1st ed. Spring 1994.
- 14- 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.).
- 15- SILVERSTEIN, R.M., WEBSTER, F.C., KIEMLE, D.J., BRYCE, D.L. *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, Wiley & Sons, ISBN: 978-0-470-61637-6.
- 16- RUSSEL, D.H. *Experimental Mass Spectrometry*, Springer, ISBN: 978-1-4899-2569-5.
- 17- HENDERSON, W., MCINDOE, J. S., *Mass Spectrometry of Inorganic Coordination and Organometallic Compounds: Tools – Techniques – Tips*, Wiley & Sons, ISBN: 9780470850152.
- 18- Artigos e revisões pertinentes, publicados em periódicos nacionais e internacionais.