

Tópicos Especiais em Química IX

Fotoquímica Inorgânica

Código: PQ513B

Pré-requisitos:

Co-requisito: PQ514A- Química Inorgânica Avançada

Horas Aulas/Semana: PRÁTICA: TEÓRICA: 4 horas

Créditos: 04

Responsável: Prof. Antonio Otávio T. Patrocínio

Objetivos: O curso visa introduzir conceitos básicos de fotoquímica molecular, em especial a de complexos metálicos. Durante o curso, o aluno deverá correlacionar os conceitos prévios de teoria de ligação e geometria molecular ao processo de absorção de luz e formação do estado excitado. Os diferentes processos de desativação do estado excitado serão estudados utilizando as teorias correntes e os métodos experimentais utilizados para a investigação desses processos serão descritos e exemplificados. Exemplos de dispositivos moleculares fotoinduzidos baseados em complexos metálicos serão citados, de forma a demonstrar a aplicabilidade da fotoquímica em diferentes situações.

Espera-se que, ao final do curso, o aluno possa utilizar os métodos e conceitos da fotoquímica molecular como ferramenta na elucidação/desenvolvimento de diferentes processos.

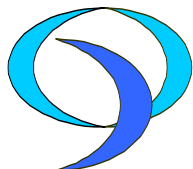
Ementa:

- Princípios de fotoquímica molecular: estados eletrônicos; processos de desativação do estado excitado
- Aspectos Cinéticos e Termodinâmicos da fotofísica de compostos de coordenação: luminescência, transferência de energia, supressão de luminescência.
- Aspectos Cinéticos e Termodinâmicos da fotoquímica de compostos de coordenação: reações de fotossustituição, fotoisomerização e transferência de elétrons fotoinduzidas.
- Métodos experimentais para o estudo das propriedades fotoquímicas e fotofísicas de compostos de coordenação.
- Aplicações da Fotoquímica Inorgânica

Programa:

1. Princípios de fotoquímica molecular

- a. Introdução: processos térmicos *versus* processos fotoinduzidos
- b. A natureza da luz: princípios de mecânica quântica
- c. Estrutura eletrônica das moléculas: A aproximação de Born-Oppenheimer, orbitais moleculares, simetria dos orbitais, aplicações em compostos de coordenação
- d. Teoria do campo ligante: espectro eletrônico de compostos de coordenação, termos espectroscópicos, parâmetros de Racah, diagramas de Tanabe-Sugano,



- e. Transições eletrônicas em compostos de coordenação: regras de seleção, transições proibidas por spin e por simetria, o princípio de Franck-Condon, Lei de Lambert-Beer.

2. Fotofísica Molecular

- Transições radiativas e não radiativas
- Acoplamento spin-órbita e efeito do átomo pesado
- Processos de transferência de energia: aspectos termodinâmicos e cinéticos
- Supressão de luminescência: aspectos cinéticos
- Técnicas experimentais para avaliação de processos fotofísicos: espectroscopia de emissão estacionária e resolvida no tempo; determinação de tempo de vida e rendimento quântico; efeito da temperatura nos processos emissivos.

3. Fotoquímica Molecular

- Reações fotoquímicas: correlação com a natureza do estado excitado
- Aspectos termodinâmicos e cinéticos das reações fotoquímicas
- Reações fotoquímicas em compostos de coordenação: fotossustituição, fotoisomerização em complexos metálicos.
- Transferência eletrônica fotoinduzida: termodinâmica; cinética; teoria de Marcus; região invertida.

4. Aplicações atuais da Fotoquímica Inorgânica

- Dispositivos emissores de luz
- Fotocaveadores e fotossensores
- Dispositivos para conversão de energia solar.

Bibliografia:

Livros textos:

- Huheey, J. E.; Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity, 4^a edição, Harper e Row, London, 1993.
- Shriver, D. F.; Atkins, P. W.; Overton, T. L.; Rourke, J. P.; Weller, M. T.; Armstrong, F. A.; Química Inorgânica, 4^a edição, Oxford University Press, Oxford, 1996.
- Gibert, A.; Baggott, J.; Essentials of Molecular Photochemistry, 1^a edição, Backwell Scientific, Oxford, 1991.
- Turro, N. J.; Modern Molecular Photochemistry, University Science Books, 1991.
- Kalyanasundaran, K.; Photochemistry of Polypyridine and Porphyrin complexes, Academic Press, London, 1992.

Literatura complementar

- Ferraudi, G. J.; Elements of Inorganic Photochemistry, Wiley Interscience Pub., New York, 1988.
- Balzani, V.; Scandola, F.; Supramolecular Photochemistry, Ellis Horwood Ltd, West Sussex, 1991.
- Schanze, K.; Ramamurthy V.; Molecular and Supramolecular



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
Instituto de Química
Programa de Pós Graduação em Química – MESTRADO
E-mail: cpgquimica@ufu.br - Fone: 3239-4385

Photochemistry, vol. 1-9.

4. Kettle, S. F. A.; Symmetry and Structure: Readable Group Theory for Chemists, 2^a edição, Willey Interscience Pub., 1995
5. Periódicos específicos:
 - a. Journal of Photochemistry and Photobiology
 - b. Photochemistry and Photobiology
 - c. Photochemistry and Photobiology reviews
 - d. Coordination Chemistry Review
 - e. Journal of the American Chemical Society
 - f. Inorganic Chemistry
 - g. Accounts on Chemical Research
 - h. Chemical Reviews
 - i. Dalton Transactions
 - j. Solar Energy Materials and Solar Cells
 - k. Progress in Photovoltaics