



Fotoquímica Inorgânica		
Código: PQ513B		Área de Concentração: Química
Carga Horária: 4h	Créditos: 04	
Responsáveis: Prof. Antonio Otávio T. Patrocínio		
<b>Objetivos:</b> <p>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.</p> <p>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.</p>		
<b>Ementa:</b> <ul style="list-style-type: none"><li>• Princípios de fotoquímica molecular: estados eletrônicos; processos de desativação do estado excitado</li><li>• Aspectos Cinéticos e Termodinâmicos da fotofísica de compostos de coordenação e óxidos metálicos: luminescência, transferência de energia, supressão de luminescência.</li><li>• Aspectos Cinéticos e Termodinâmicos da fotoquímica de compostos de coordenação e óxidos metálicos: reações de fotossustituição, fotoisomerização e transferência de elétrons fotoinduzidas.</li><li>• Métodos experimentais para o estudo das propriedades fotoquímicas e fotofísicas.</li><li>• Aplicações da Fotoquímica Inorgânica em catálise e conversão de energia</li></ul>		
<b>Programa:</b> <ol style="list-style-type: none"><li><b>1. Princípios de fotoquímica molecular</b><ol style="list-style-type: none"><li>a. Introdução: processos térmicos <i>versus</i> processos fotoinduzidos</li><li>b. A natureza da luz: princípios de mecânica quântica</li><li>c. Estrutura eletrônica das moléculas: uma breve revisão</li><li>d. 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.</li><li>e. Transições eletrônicas em óxidos metálicos: teoria de bandas</li></ol></li><li><b>2. Processos Fotofísicos</b><ol style="list-style-type: none"><li>a. Transições radiativas e não radiativas</li><li>b. Acoplamento spin-órbita e efeito do átomo pesado</li><li>c. Processos de transferência de energia: aspectos termodinâmicos e cinéticos</li><li>d. Supressão de luminescência: aspectos cinéticos</li></ol></li></ol>		



e. 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. Processos Fotoquímicos

- a. Reações fotoquímicas: correlação com a natureza do estado excitado
- b. Aspectos termodinâmicos e cinéticos das reações fotoquímicas
- c. Reações fotoquímicas em compostos de coordenação: fotossubstituição, fotoisomerização em complexos metálicos.
- d. Transferência eletrônica fotoinduzida: termodinâmica; cinética; teoria de Marcus; região invertida.
- e. Transferência eletrônica em sistemas heterogêneos: óxidos metálicos, nanopartículas; aspectos cinéticos e termodinâmicos.

### 4. Aplicações atuais da Fotoquímica Inorgânica

- a. Dispositivos emissores de luz
- b. Fotochaveadores e fotossensores
- c. Fotocatálise homogênea e heterogênea
- d. Dispositivos para conversão de energia solar.

### Bibliografia:

#### *Livros textos:*

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

#### *Literatura complementar*

1. Ferraudi, G. J.; Elements of Inorganic Photochemistry, Willey Interscience Pub., New York, 1988.
2. Balzani, V.; Scandola, F.; Supramolecular Photochemistry, Ellis Horwood Ltd, West Sussex, 1991.
3. Schanze, K.; Ramamurthy V.; Molecular and Supramolecular Photochemistry, vol. 1-9.
4. Kettle, S. F. A.; Symmetry and Structure: Readable Group Theory for Chemists, 2<sup>a</sup> 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



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL  
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA  
INSTITUTO DE QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA



- g. Accounts on Chemical Research
- h. Chemical Reviews
- i. Dalton Transactions
- j. Solar Energy Materials and Solar Cells

Progress in Photovoltaics