



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

Código: PQ516

Área de Concentração: Química

Carga Horária: 60h

Créditos: 4

Responsáveis:

Edson Nossol
Gustavo Von Poelhsitz
Jefferson Luis Ferrari
Renata Cristina de Lima

Objetivos: Introduzir os fundamentos das técnicas de caracterização essenciais no estudo de compostos inorgânicos: técnicas espectroscópicas – RMN, UV-vis, IV, Raman, fotoluminescência, difração de raios X de pó - DRX e microscopia eletrônica – 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. Espectroscopia de Fotoluminescência aplicada a compostos inorgânicos. Difração de raios X de pó 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.



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



- 5- Espectroscopia de Luminescência aplicada a compostos Inorgânicos.
 - 5.1 - Principais usos da luminescência nos mais diversos tipos de tecnologia.
 - 5.2 - Espectros de emissão, espectros de excitação, espectros de absorção, diagrama de Jablonski, tempo de vida estado excitado, mecanismos de transferência de energia.
 - 5.3 - Influência da matriz inorgânica na forma dos espectros de emissão e de excitação.
 - 5.4 - Teoria de Bandas, fotoluminescência de semicondutores, fotoluminescência em elementos Terras Raras.
 - 5.5 - Níveis de energia dos elementos Terras Raras, teoria do campo cristalino, contração lantanídica, mecanismos de desativação do estado excitado.

- 6- Difração de raios X (DRX) de pó aplicada a sólidos inorgânicos.
 - 6.1 - Fundamentos da técnica DRX.
 - 6.2 - Preparação das amostras.
 - 6.3 - Sólidos cristalinos e amorfos.
 - 6.4. Análise dos difratogramas.

- 7- Microscopia eletrônica aplicada a sólidos inorgânicos.
 - 7.1 - Fundamentos da técnica de microscopia eletrônica.
 - 7.2 - Microscopia eletrônica de varredura (MEV): análise das imagens obtidas.
 - 7.3 - 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 Wiley & Sons, New York, 1967.
- 3- MOTHE, 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- 2. 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



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



and optoelectronic applications). Inclui bibliografia e índice. ISBN 9780470058183 (enc.).
15- Artigos e revisões pertinentes, publicados em periódicos nacionais e internacionais.