



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

**Código:** PQ516

**Área de Concentração:** Química

**Carga Horária:** 60h

**Créditos:** 4

**Responsáveis:**

Antônio Otávio de Toledo Patrocínio

Edson Nossol

Gustavo Von Poelhsitz

Renata Cristina de Lima

Wendell Guerra

**Objetivos:** Introduzir os fundamentos das técnicas de caracterização essenciais no estudo de compostos inorgânicos: análise térmica - TG/DSC, técnicas espectroscópicas – RMN, UV-vis, IV e Raman, difração 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:** Análise térmica e suas aplicações em química de coordenação. Ressonância magnética nuclear aplicada a compostos inorgânicos. Espectroscopia eletrônica – Ultravioleta e visível – aplicada a compostos de coordenação. Espectroscopia vibracional – Infravermelho – aplicada a compostos inorgânicos. Espectroscopia Raman – aplicada a compostos inorgânicos. Difração de Raios X de pó aplicada a sólidos inorgânicos. Microscopia eletrônica aplicada a sólidos inorgânicos.

**Programa:**

- 1- Análise térmica e suas aplicações em química de coordenação
  - 1.1 - A técnica TG/DSC - características gerais
  - 1.2 - Fatores que afetam a reprodutibilidade de uma curva termogravimétrica
  - 1.3 - Aplicações em química de coordenação
- 2- Ressonância magnética nuclear aplicada a compostos inorgânicos
  - 2.1 - Fundamentos da espectroscopia de ressonância magnética nuclear.
  - 2.2 - Determinação estrutural em química inorgânica utilizando RMN de  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{31}\text{P}$  e  $^{195}\text{Pt}$
- 3- Espectroscopia eletrônica – Ultravioleta e visível – aplicada a compostos de coordenação
  - 3.1 - Bandas de transferência de carga.
  - 3.2 - Transições de campo ligante, regras de seleção e intensidade das bandas.
  - 3.3 - Diagramas Tanabe-Sugano.
- 4- Espectroscopia vibracional – Infravermelho – aplicada a compostos inorgânicos
  - 4.1 - Fundamentos da técnica de IV
  - 4.2 - Preparação das amostras
  - 4.3 - Análise dos espectros de compostos inorgânicos



- 5- Espectroscopia Raman – aplicada a compostos inorgânicos
- 5.1 – Fundamentos da técnica de espectroscopia Raman
- 5.2 – Análise dos espectros de compostos inorgânicos
- 5.3 – Aplicações da técnica na identificação de compostos inorgânicos

- 6- Difração de Raios X 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 - Microscopia eletrônica de varredura: análise das imagens obtidas
- 7.2 - Microscopia eletrônica de transmissão: 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- 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- 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- Artigos e revisões pertinentes, publicados em periódicos nacionais e internacionais.