

## **IQU-850 Métodos de Caracterização de Sólidos e Compostos Moleculares (60 horas)**

Ementa:

Fundamentos e aplicações de ressonância paramagnética eletrônica, espectroscopia Mössbauer, métodos eletroquímicos, espectroscopia vibracional (Infravermelho e Raman), microscopia, dicroísmo circular e eletroforese capilar em sistemas químicos (compostos inorgânicos, química supramolecular, catálise, etc.). Objetiva introduzir os fundamentos, aplicações e as complementaridades dos métodos físicos na caracterização de sistemas químicos, preocupando-se em tornar o aluno um usuário consciente das técnicas estudadas e não um especialista.

### **Resonância paramagnética eletrônica**

Fundamentos; Estrutura fina; Anisotropia; Estrutura Hiperfina; Estrutura Superhiperfina; Aparelhagem; Interpretação de alguns espectros; Aplicações em sistemas químicos.

### **Espectroscopia Mössbauer**

Introdução a Espectroscopia Mössbauer; Interações hiperfinas (Deslocamento Isomérico; Desdobramento Quadrupolar; Desdobramento magnético); Efeitos de tempo e temperatura; Aplicações estruturais e caracterização; CEMS; Aplicações em sistemas químicos.

### **Métodos Eletroquímicos**

Introdução a métodos eletroquímicos; Aplicabilidade em química inorgânica; Voltametria Cíclica; Coulometria; Espectroeletrólise; Aplicações em sistemas químicos.

### **Espectroscopia Vibracional**

Translações, rotações e vibrações moleculares; Espectroscopia de absorção no infravermelho e espalhamento Raman; Atividade de modos normais de vibração no infravermelho e no Raman; Espectroscopia rotacional: influência do espectro rotacional no espectro vibracional; Aplicações em sistemas químicos.

### **Microscopia**

Fundamentos básicos; SEM; TEM; Microscópio eletrônico; Metodologia de preparação da amostra; Complementaridade das técnicas; Outras técnicas: Tunelamento, força atômica, etc; Aplicação em sistemas químicos.

### **Dicroísmo Circular**

Reconhecimento quirais; Atividade ótica; Espectroscopia convencional *versus* espectroscopia quirótica; Mecanismos de geração de atividade ótica; Aplicação em sistemas supramoleculares.

### **Eletroforese Capilar**

Fundamentos; Aparelhagem; Eletroforese capilar *versus* eletroforese em gel; Fluxo eletrosmótico; Fatores que afetam o fluxo eletrosmótico; Eletroforese capilar de zona; Cromatografia capilar eletrocínica micelar; Determinação de constantes de equilíbrio.

Bibliografia:

1. Drago, Russel S.; "Physical Methods in Chemistry", 2a edição, Saunders College, 600 pp., 1992.
2. D. L. Alger, "Electron Paramagnetic Resonance", Interscience, New York, 186 pp 1968.
3. N.M. Atherton, "Electron Spin Resonance", 2a edition, Ellis Horwood, Chichester, 448 pp., 1973.
4. R.V. Parish, "NMR, EPR and Mössbauer Spectroscopy in Inorganic Chemistry", Ellis Horwood, Chichester, 224 pp., 1990.
5. Gutlich, P.; Link, R.; Trautwein, A., "Mössbauer Spectroscopy and Transition Metal Chemistry", Springer-Verlag, 186pp., 1978.
6. Dickson, D. P. E.; Berry, F. J., "Mössbauer Spectroscopy", Cambridge University Press, 288 pp., 1986.
7. Kissinger, P. T.; Heineman, W. R., "Laboratory Techniques in Electroanalytical Chemistry", Marcel Dekker, 1008 pp., 1984.
8. Joseph Wang, Analytical Electrochemistry, Third Edition, Wiley-VCH, 2006 and Allen J. Bard and Larry R. Faulkner, Electrochemical Methods: Fundamentals and applications, Second Edition, Wiley, 2000.
9. Skoog, D. A.; Leary, J. L., "Principles of Instrumental Analysis", 4a edição, Saunders College, 1039 pp., 1992.

10. G. Herzberg, "Spectra of Diatomic Molecules", Van Nostrand-Reinhold, 257 pp., 1950.
11. J. E. Huheey, E. A. Keiter e R. L. Keiter, "Inorganic Chemistry - Principles of Structure and Reactivity", Harper-Collins, 4a ed., 964 pp., 1993.
12. S. Wischnitzer, "Introduction to electron microscopy", 5 Edition, Pergamon Press, New York , 404 pp., 2001.
13. D. R. Baker, "Capillary Electrophoresis", John Wiley, New York, 1995.
14. M. Urbanová, P. Malon, "*Circular Dichroism Spectroscopy*," In: C.A.Schalley, "Analytical Methods in Supramolecular Chemistry", Wiley-VCH, Weinheim, 2007; and L. C. Sawyer, "Polymer Microscopy", Chapman & Hall, 1987.
15. P.S.P.H. Junior, L.H.C. Mattoso, R.B. Filho, J. Frommer, G.A.G. Cidade, P.M. Bisch, G. Weissmüller, Microscopias de Varredura por Sonda - Aspectos Práticos e suas Aplicações na Nanociência e na Nanotecnologia, In: N. Durán, L.H.C. Mattoso, P.C. de Moraes, "Nanotecnologia- Introdução, Preparação e Caracterização de Nanomateriais e Exemplos de Aplicação", Artliber editora, 2006.