

DEPARTAMENTO: QUÍMICA

DISCIPLINA: Técnicas de Caracterização de Compostos de Coordenação

SIGLA: TCC

CARGA HORÁRIA TOTAL: 60 horas

TEORIA: 60 horas

PRÁTICA:

CURSO: Doutorado Acadêmico em Química Aplicada

PRÉ-REQUISITOS:

PROFESSOR RESPONSÁVEL: Fernando Roberto Xavier

EMENTA

Análise elementar de CHN. Termogravimetria. Espectrometria de massas. Condutividade molar. Eletroquímica. Espectroscopia vibracional: Infravermelho e Raman. Espectroscopia eletrônica UV-Vis-NIR. Medidas magnéticas: O método de Evans. Difração de raios X.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

UNIDADE 1 – ANÁLISE ELEMENTAR DE CHN

- 1.1. Introdução à técnica;
- 1.2. Instrumentação;
- 1.3. Manuseio da amostra;
- 1.4. Interpretação dos resultados.

UNIDADE 2 – ANÁLISE TERMOGRAVIMETRIA (TGA) E A CALORIMETRIA EXPLORATÓRIA DIFERENCIAL (DSC)

- 2.1. Introdução às técnicas;
- 2.2. Instrumentação;
- 2.3. Manuseio da amostra;
- 2.4. Curvas térmicas e interpretação dos resultados.

UNIDADE 3 – ESPECTROMETRIA DE MASSAS

- 3.1. Introdução à técnica;
- 3.2. Instrumentação;
- 3.3. O espectro de massas;
- 3.4. Interpretação dos espectros;
- 3.5. Fragmentações e rearranjos.

UNIDADE 4 – CONDUTIVIDADE MOLAR

- 4.1. Introdução à técnica;
- 4.2. Instrumentação;
- 4.3. Tipos de eletrólitos e razões entre eletrólitos;
- 4.4. Interpretação dos resultados.

UNIDADE 5 – ELETROQUÍMICA

- 5.1. Introdução às técnicas de voltametria cíclica (CV) e voltametria de onda quadrada (SW);
- 5.2. Instrumentação;
- 5.3. Interpretação dos resultados;
- 5.4. Parâmetros de reversibilidade.

UNIDADE 6 – ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL

- 6.1. Introdução às técnicas de espectroscopia de infravermelho e espectroscopia Raman;
- 6.2. Instrumentação;
- 6.3. Manuseio da amostra;
- 6.4. Interpretação dos espectros;
- 6.5. Frequências características de grupamentos específicos;
- 6.6. Análises de modos vibracionais via teoria de grupo.

UNIDADE 7 – ESPECTROSCOPIA ELETRÔNICA UV-VIS-NIR

- 7.1. Introdução à técnica;
- 7.2. Instrumentação;
- 7.3. Solventes típicos e solvatocromismo;
- 7.4. Interpretação dos resultados.

UNIDADE 8 – MEDIDAS MAGNÉTICAS

- 8.1. Introdução à técnica de medidas *spin-only* via método de Evans;
- 8.2. Instrumentação: A balança de Gouy e medidas via RMN;
- 8.3. Interpretação dos resultados e cálculos de susceptibilidade magnética.

UNIDADE 9 – DIFRAÇÃO DE RAIOS X

- 9.1. Introdução à técnica de difração de raios x em monocristais;
- 9.2. Instrumentação;
- 9.3. Processos de cristalização;
- 9.4. Interpretação dos resultados e dados cristalográficos.

BIBLIOGRAFIA

BÁSICA:

1. SHRIVER, D.F.; ATKINS, P.W.; LANGFORD, C.H. Química Inorgânica. 4ª ed. Porto Alegre: Bookman, 2008.

- HOUSECROFT, C. E. Química Inorgânica, v. 1 e 2. 4ª ed. Rio de Janeiro: LTC, 2013.
- SKOOG, D. A.; WEST, D. M.; HOLLER, F. J.; CROUCH, S. R. Fundamentals of Analytical Chemistry. 9ª ed. Belmont, CA: Cengage Learning. 2014.

COMPLEMENTAR:

- WAGNER, M. Thermal Analysis in Practice: Fundamental Aspects. Munich: Hanser Publishers, 2017.
- HENDERSON, W. and McINDOE, J. S. Mass Spectrometry of Inorganic, Coordination and Organometallic Compounds. West Sussex, England: John Wiley & Sons, 2005.
- ZANELLO, P. Inorganic Electrochemistry - Theory Practice and Application. Cambridge, UK: RCS, 2003.
- NAKAMOTO, K. Infrared and Raman spectra of inorganic and coordination compounds, Part A, Foundations. West Sussex, England: John Wiley & Sons, 2009.
- NAKAMOTO, K. Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, Part B, Applications in Coordination, Organometallic, and Bioinorganic Chemistry. West Sussex, England: John Wiley & Sons, 2009.
- GEARY, W. J. The use of conductivity measurements in organic solvents for the characterization of coordination compounds. Coordination Chemistry Reviews, 7 (1971) 81-122.
- VELHO, R. G. Medidas de condutividade na caracterização de complexos inorgânicos: Um levantamento bibliográfico. Dissertação de mestrado. Programa de Pós-graduação em Química - UFSCar, 2006.