



INSTITUTO DE QUÍMICA da UFRJ
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÂNICA

Programa de Disciplina

Nome: **Materiais Inorgânicos Moleculares**

Código: **IQG 481**

CARACTERÍSTICAS

Categoria:	ELETIVA
Carga Horária Semanal:	2 (TEÓRICA)
Número de Semanas Previstas para a Disciplina:	15
Número de Créditos da Disciplina:	2
Pré-Requisito <i>para a Disciplina</i> :	QUÍMICA DE COORDENAÇÃO (IQG 241)
Cursos para os quais a Disciplina é Indicada:	QUÍMICA QUÍMICA - ATRIBUIÇÕES TECNOLÓGICAS



INSTITUTO DE QUÍMICA da UFRJ

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÂNICA

PROGRAMA ANALÍTICO

- 1 INTRODUÇÃO A QUÍMICA DOS LANTANÍDEOS.** (CARGA HORÁRIA RECOMENDADA 4 HORAS)
 - 1.1 Ocorrência na natureza e formas de separação
 - 1.2 Características dos elementos e principais Propriedades Periódicas
 - 1.3 Compostos de coordenação: números de coordenação e exemplos
 - 1.4 Propriedades Físicas: Eletrônicas e Magnéticas
 - 1.5 Aplicações

- 2 PROPRIEDADES MAGNÉTICAS DE SISTEMAS MOLECULARES.** (CARGA HORÁRIA RECOMENDADA 12 HORAS)
 - 2.1 Momento Magnético de um Elétron.
 - 2.2 O Hamiltoniano de Spin e a Equação de Van Vleck.
 - 2.3 Modelos e Hamiltoniano de sistemas interagentes
 - 2.4 O Tunelamento Quântico da Magnetização.
 - 2.5 Orbitais Magnéticos e Regras de Goodenough-Kanamori.
 - 2.6 Estruturas Metalorgânicas Estendidas (MOFs).
 - 2.7 Sistemas com multiestabilidade magnética.
 - 2.8 Interruptores Moleculares Magnéticos.
 - 2.9 Fotomagnetismo.
 - 2.10 Nanopartículas Magnéticas.
 - 2.11 Aplicações Avançadas: Spintrônica e Cálculo Quântico com Magnetos Moleculares.

- 3 TRANSFERÊNCIA DE ELÉTRONS EM MATERIAIS MOLECULARES.** (CARGA HORÁRIA RECOMENDADA 10 HORAS)
 - 3.1 Modelo de Transferência de Elétrons de Marcus e Hush.
 - 3.2 Mecanismos de Transferência de Elétrons (Esfera Interna e Esfera Externa).
 - 3.3 Compostos a Valência Mista.
 - 3.4 Aspectos Termodinâmicos e Cinéticos da Transferência do Elétron.
 - 3.5 Determinação experimental da Interação Eletrônica.
 - 3.6 Transferência de Elétrons em Sistemas Biológicos.
 - 3.7 Conductividade, Semiconductividade e Supercondutividade em Sistemas Moleculares.
 - 3.8 Sais a Transferência de Carga.
 - 3.9 Transição de Peierls e Ondas de Densidade de Carga.
 - 3.10 Compostos poliméricos Condutores.



INSTITUTO DE QUÍMICA da UFRJ

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÂNICA

- 3.11 Efeito Kondo em Junções Moleculares.
- 3.12 Condutividade em sistemas moleculares.
- 3.13 Propriedades Ópticas, Semicondutoras e Magnéticas dos Pontos Quânticos.
- 3.14 Aplicações: Nanoeletrônica Híbrida, Transistor Moleculares e Elementos de Memória Nanoestruturados.

4 **FOTOQUÍMICA.** (CARGA HORÁRIA RECOMENDADA 4 HORAS)

- 4.1 Hamiltoniano de Fotoexcitação.
- 4.2 Transferência de Elétrons no Estado Fotoexcitado.
- 4.3 Fotodíodos Moleculares.
- 4.4 Células solares sensibilizadas corantes.
- 4.5 O Efeito Antena e a Coleção da Luz.
- 4.6 Processo de Foster de Transferência de Energia.
- 4.7 Fotólise de Água.

LIVROS RECOMENDADOS.

- 1 Gispert J. R.; Coordination Chemistry; Wiley VCH, 2008
- 2 Launay, JP and Verdaguer, M.; Electrons in Molecules: From Basic Principles to Molecular Electronics”, Oxford University Press, 2014
- 3 Kahn, O.; Molecular Magnetism, VCH: New York, NY, 1993
- 4 Halcrow M. A.; Spin-Crossover Materials: Properties and Applications; Editor, Wiley – VCH, 2013
- 5 Cotton S.; Lanthanide and Actinide Chemistry; John Wiley & Sons Ltd., Chichester, England, 2006