



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
CRONOGRAMA DE DISCIPLINA
2º semestre de 2016

DISCIPLINA: TÓPICOS ESPECIAIS EM QUÍMICA INORGÂNICA - CÓDIGO: CQ153

NATUREZA: SEMESTRAL

CARGA HORÁRIA SEMANAL: TEÓRICA: 02H, PRÁTICA: 00H, TOTAL: 02h

CURSO: Bacharelado e Licenciatura em Química (T. OP2, quartas-feiras, 17:30-19:30h)

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO:

“Introdução à Química dos Lantanídeos e Suas Aplicações”

1. Ocorrência na natureza

2. Métodos de extração e separação

3. Características dos elementos:

Posição na Tabela Periódica e principais Propriedades Periódicas

4. Propriedades Químicas:

Principais compostos de Lantanídeos nos estados de oxidação +2, +3 e +4

Compostos de coordenação: números de coordenação e exemplos

5. Propriedades Físicas: Eletrônicas e Magnéticas

6. Aplicações:

Em síntese e catálise, Luminescência (Efeito antena, Sondas, TV, Iluminação e Lasers), Baterias, Sensores, Biológicas e Médicas, Industriais

Observação:

É desejável (mas não obrigatório) que o aluno tenha algum conhecimento prévio sobre Compostos de Coordenação (complexos metálicos) e princípios de Teoria de Campo Cristalino, para melhor acompanhamento da disciplina.

AVALIAÇÃO :

Seminários (individuais ou em grupos) sobre temas científicos e tecnológicos encontrados em periódicos científicos atuais.

REFERÊNCIAS BÁSICAS:

1. Shriver, D.F.; Atkins, P.W. et alli, Química Inorgânica, Trad. 4 a ed. inglesa, Bookman, Porto Alegre, 2008
2. Lee, J.D.; Química Inorgânica Não Tão Concisa, Trad. 5 a ed. inglesa, Ed. Edgard Blücher Ltda, São Paulo, 1999
3. Cotton, S., Lanthanide and Actinide Chemistry, John Wiley & Sons Ltd., Chichester, England, 2006
4. Gaft, M.; Reisfeld, R.; Panczer, G., Luminescence Spectroscopy of Minerals and Materials, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005
5. Wikipedia, The Free Encyclopedia, Lanthanide, <https://en.wikipedia.org/wiki/Lanthanide#References>, acessada em 10/05/2016
6. Atwood, D.A. (Ed.), The Rare Earth Elements: Fundamentals and Applications, John Wiley & Sons, 2012
7. Artigos científicos publicados em periódicos

Curitiba, 06 de junho de 2016

Prof. Dr. João Batista Marques Novo

homepage: www.quimica.ufpr.br/jbm Novo

e-mail: jbm Novo@ufpr.br

BIBLIOGRAFIA ADICIONAL:

Relatórios, artigos e seminários publicados pelos

DNPM - Departamento Nacional de Produção Mineral

Ministério de Minas e Energia/Brasil

<http://www.dnpm.gov.br/>

<http://www.dnpm.gov.br/assuntos/ao-publico/biblioteca-dnpm>

USGS

U. S. Geological Survey

U. S. Department of the Interior/USA

<https://www.usgs.gov/>

Multimídia disponibilizada na internet pelos seguintes professores:

Prof. Dr. Fernando Roberto Xavier

Universidade do Estado de Santa Catarina (UDESC)

<http://www.joinville.udesc.br/portal/professores/frxavier/>

fernando.xavier@udesc.br

Prof. Dr. José Pedro Donoso

Universidade de São Paulo

Instituto de Física de São Carlos – IFSC

<http://www.ifsc.usp.br/~donoso/>

<http://www.ifsc.usp.br/index.php?>

[option=com_content&view=article&id=82&Itemid=102&codigo=149](http://www.ifsc.usp.br/index.php?option=com_content&view=article&id=82&Itemid=102&codigo=149)

Prof. Dr. Thomas Jüstel

FH Münster

University of Applied Sciences

<https://www.fh-muenster.de/fb1/personal/professoren/juestel/studiumdownloadportal.php>

Maria Claudia França da Cunha Felinto

IPEN- SP

mfelinto@ipen.br

http://pelicano.ipen.br/PosG30/Consulta_Orientador_Aluno.php?o=Maria%20Claudia%20Fran%20E7a%20da%20Cunha%20Felinto

CRONOGRAMA:

Semana	Conteúdo a ser ministrado
1	Apresentação da disciplina, Divisão dos alunos em equipes, Seleção dos temas das equipes para seminários (pedir pendrives para próxima aula) <i>Matriculas dos alunos por meio de quebra de pré-requisito da disciplina: procurar a coordenação do curso de Química até sexta-feira, dia 05/08/2016</i>
2	Introdução aos elementos lantanídeos: Etimologia, Ln e Terras Raras, Posição na Tabela Periódica (resumida), Histórico <i>Distribuição dos arquivos pdf com os temas de seminários para os alunos</i>
3	Ocorrência e abundância dos Ln na natureza (USGS, Tab.Reisfeld), Usos dos Ln
4	Métodos de extração e separação de Ln (Lee, Cotton)
5	Introdução à estrutura eletrônica dos átomos: Modelo da Mecânica Quântica (MQ): a) Eq. Básica da MQ – Eq. Schrodinger - Função de Onda (FO) b) Números quânticos n, l, ml e ms; Orbitais atômicos s, p, d, f (forma e fases da FO) c) Distribuição eletrônica dos átomos – Princípio de Aufbau – Princípio da exclusão de Pauli e Regra de Hund – configuração eletrônica de elementos de transição d) Diagrama de Linus Pauling e Diagramas de Rich-Suter – elementos de configuração "irregular": casos do Cr e Cu.
6	Tabela Periodica (TP): a) Histórico e Tipos de tabelas periódicas: Mendeleev, Parafuso Telúrico, Circular, Espiral, Galáxia (recente), e a recomendada pela IUPAC (7 Períodos e Grupos 1 a 18) b) Relação entre posição na TP e configuração eletrônica: Configurações eletrônicas dos elementos de transição e lantanídeos, apresentando as configurações “irregulares” por meio do Diagramas de Rich-Suter (Cr, Cu, e alguns Ln) Apresentar com mais detalhes as configurações eletrônicas dos Ln, Ln ²⁺ , Ln ³⁺ e Ln ⁴⁺
7	Tabela Periodica (TP) - Continuação: c) Principais propriedades periódicas dos lantanídeos Figura Distribuicao Radial da Funcoes Onda 4f, 5s, 5p e 6s Raio e contração lantanídica: Configuração regular dos íons Ln ³⁺ e raio iônico decrescente (contração lantanídica): Pontos de ebulição dos metais Ln Energias de ionização Entalpias de hidratação dos íons Ln Entalpias de formação para compostos de Ln: Estabilidade de tetrahaletos, dihaletos e aqua-íons Potenciais de redução
8	Principais compostos químicos nos estados de oxidação +II, +III e +IV
9	Compostos de coordenação de Ln: Geometria e números de coordenação

10	Propriedades Eletrônicas dos Lantanídeos: - Níveis de energia: - Efeitos Repulsão Eletrônica (RE, acoplamento Russel-Saunders) , Acoplamento .Spin-Órbita (SO), Campo Cristalino (CC) - Explicar a magnitude dos efeitos de: RE, SO, CC, Mag, Hyp (Comparar metais transição e Lantanídeos) - Estados eletrônicos fundamental para os Ln (Regra de Hund, com acoplamento SO) - Estados eletrônicos excitados e luminescentes dos Ln (Diagrama níveis de energia)
11	Propriedades Eletrônicas dos Lantanídeos (continuação) - Cores: Transições eletrônicas: - Espectro Eletromagnético e interação radiação EM-materia - Principais centros luminescentes em minerais (GaftReisfeld) - Princípio da Conservação de energia, Regras de seleção: Laporte (Simetria/Paridade) e Spin - Diagrama de coordenadas configuracionais e Diagramas Jablonski, transições eletrônicas: Bandas finas (linhas) f-f e bandas largas (f-d e TC)
12	a) Espectros Eletrônicos e Aplicações Ópticas dos Ln: - Resumo das aplicações - Espectrômetro TRLS - Características dos espectros: transições proibidas, bandas largas (f-d ,TC) e finas (f-f) - Efeito antena e escolha da antena - Sondagem espectroscópica (número de níveis J em diferentes simetrias) b) Propriedades magnéticas dos Ln e suas aplicações : - magnetos, EPR, NMR shift e MRI imageamento -16/nov: Este é o último dia para entregar os 2 arquivos do seminário
13	Seminários - Começam em 23/nov - Entregar os 2 arquivos do seminário no máximo até 16/nov <i>Outras aplicações (deixar para temas dos seminários):</i> <i>Laser: emissão estimulada</i> <i>LED e iluminação, up e down conversion, imageamento de raios-x</i> <i>Síntese e catálise</i> <i>Baterias</i> <i>Biológicas e médicas: sonda, MRI</i> <i>Industrial: Lasers, cerâmicas para polimento, etc</i>
14	Seminários
15	Seminários

Tópicos para seminários:

1) Para cada elemento lantanídeo (um elemento atribuído a cada grupo):

Aplicações científicas e tecnológicas do Lantanídeo selecionado:

- a) Ópticas: Iluminação (LED, lâmpadas), lasers, TV
- b) Baterias
- c) Biológicas/médicas (Sondas fluorescentes, imageamento por ressonância magnética)
- d) Industrial: lasers, cerâmicas de polimento, magnetos, etc.
- e) Síntese/Catálise
- f) Outras

Não (muito extenso):

2) Sobre cada um dos lantanídeos (exceto Pm que é radioativo):

Histórico da descoberta,
Ocorrência,
Extração e produção,
Compostos químicos mais comuns,
Aplicações científicas e tecnológicas

Cada grupo deve entregar os seguintes documentos (pode-se utilizar o Libre Office ou o Word para sua edição):

1) Arquivo .pdf contendo um **resumo sobre o tema pesquisado** (identificar no nome do arquivo: Z-Ln-data, por exemplo: **63-Eu-2016s2.pdf**). **O resumo deve também conter as palavras-chaves da pesquisa efetuada e toda a literatura consultada, citada de forma completa.**

2) Arquivo de **apresentação multimídia** ("Powerpoint" ou similar do Libre Office, com a mesma identificação no nome do arquivo). **A apresentação multimídia será realizada utilizando este notebook, e terá duração de 05 minutos por aluno, no máximo.**

Fontes e referências para as pesquisas:

Periódicos CAPES: (digitar "periodicos capes" na barra de pesquisa do Google e selecionar o link do Portal de Periodicos):

http://www-periodicos-capes-gov-br.ez22.periodicos.capes.gov.br/index.php?option=com_phome

Atenção: Para se fazer o download de artigos pdf do Portal de Periódicos deve-se ter uma conta de e-mail oficial da ufpr). Configurar no navegador (Browser):

Endereço proxy: **proxy.ufpr.br** porta: **3128**

Internet (de preferência os sites em inglês, que são mais completos):

<http://www.howstuffworks.com/>

<https://www.wikipedia.org/>

Seminários 2016s2: próxima página

Seminários 2016s2:

Semi nário	Z	Símbolo	Elemento	Nome(s) do(s) aluno(s)	Resu mo	Seminá rio	Média
1		Ln	Ln em geral Situação do Brasil	Fernanda Bueno Vieira Joana Carolina Biazi Leticia Tereski			
2	57	La	Lantânio	Yasmin Betezek Schlichta Lucas Antonio Ferreira da Rocha			
3	58	Ce	Cério	Murilo Gonçalves da Rocha Bruna Gomes Dias			
4	59	Pr	Praseodímio	Debora Paulus soares Rayssa Pereira de Jesus			
5	60	Nd	Neodímio	Bruna Medeiros da Silva Luciane Novaes Tenório			
xxx	61	Pm	Promécio	xxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxxx			
6	62	Sm	Samário	Modigliane Cordeiro Gonçalves Denny Andrew da Silva Gabriel Felipe Soltoski Bridarolli			
7	63	Eu	Európio	Carolina Machado Terzi Leonardo Henrique dos Santos Fernando Tsunemi Augusto			
8	64	Gd	Gadolínio	Emily Yamagutti Watanabe André Luiz Bernardi Melinski			
9	65	Tb	Térbio	Caroline Mariano Ferreira Renaldo Marcos da Silva Júnior Guilherme Obialske de Andrade Cruz			
10	66	Dy	Disprósio	Marcelo Carpes Nunes Ana Paula Glislere			
11	67	Ho	Hólmio	Dhienifer Nataly Fabri Leonardo Cardoso de Oliveira Clara Carolina De Almeida			
12	68	Er	Érbio	Carolina Dias Bressan Sara Renata Gonçalves			
13	69	Tm	Túlio	Carmem Nursiah Jost Ana Paula da Rocha Preidum Rodolfo Ferreira dos Santos			
14	70	Yb	Ítérbio	Cesar Augusto do Amaral Rafael José da Silva Jeanluca Vergopolan			
15	71	Lu	Lutécio	Natália Rodrigues da Costa Pedro Henrique da Silva Diego Alves Lisboa			
16		Ln	Magnéticas	André Ferrarini			

Semi nário	Z	Símbolo	Elemento	Nome(s) do(s) aluno(s)	Resu mo	Seminá rio	Média
				Guilherme Augusto Barbosa (PG)	x	x	x
17		Ln	Síntese/catálise				
18		Ln	Baterias				
19		Ln	Industriais				
20		Ln	Biológicas Médicas				
21		Ln	Ópticas				