
Nome da Disciplina: Espectroscopia no Infravermelho aplicada à ciência dos minerais, ambientais e nucleares

Área de Concentração: CTMA() CTMI(X) CTRA()

Nível: M/D **Optativa:** X

Carga Horária: 39,2 aulas (de 50' cada) **Número de Créditos:** 2 (32,7 horas de aula)

Professor(es): Paulo César Horta Rodrigues

EMENTA

Objetivo: Apresentar os princípios físico-químicos da espectroscopia na faixa do infravermelho e as bases instrumentais dessa técnica e ciência analítica. Na sequência será ministrado o eixo focal da disciplina: interação do espectro eletromagnético no infravermelho médio e os princípios mineralógicos, com especial atenção aos fundamentos da cristalquímica e à aplicação da técnica na identificação dos minerais. Em uma terceira etapa serão abordadas as aplicações da técnica no âmbito das ciências ambientais com o detalhamento para a relação entre as funções tecnológicas dos argilominerais (bentonitas, por exemplo), sua função como barreiras hidroambientais e sua caracterização pelo infravermelho. Em uma última parte da disciplina serão apresentados os usos de misturas minerais que podem, por exemplo, atuar como barreiras na dispersão de radionuclídeos e a caracterização desses processos por meio dessa ciência espectroscópica.

Temas:

Módulo 1 - Princípios físico-químicos da espectroscopia de raios no infravermelho (IV)

- O espectro eletromagnético e a interação com a matéria
- As faixas espectrais no IV e os tipos de vibração
- Os princípios instrumentais e os equipamentos laboratoriais, em especial os espectrofotômetros com transformada de Fourier (FTIR) e a modalidade de *Attenuated Total Reflectance* (ATR)
- As grandezas espectroscópicas
- Os grupos funcionais e as propriedades do espectro de IV médio
- A preparação de amostras e as técnicas de varredura de espectros (FTIR/ATR)
- As formas de apresentação de resultados
- As leis de Lambert/Beer (análise quantitativa)

Módulo 2 - A espectroscopia de raios no infravermelho e a ciência dos minerais

- Ligações químicas
- Critério da classificação dos minerais
- Princípios da Cristalquímica
- Os grupos dos silicatos e suas estruturas
- Os argilominerais
- Os grupos funcionais da Química x grupos aniônicos da Mineralogia
- A espectroscopia no infravermelho e sua relação com a classificação dos minerais
- As frequências vibracionais dos minerais e de seus grupos
- As outras aplicações do IV na mineralogia:
 - Séries isomórficas
 - Caracterização químico-estrutural
- Espectros de minerais no infravermelho
- As bibliotecas de espectros (impressas, digitais e online)

Módulo 3 – Aplicações do infravermelho nas ciências ambientais e nucleares

- Aplicações ambientais:
 - Argilas como barreiras hidráulicas/de engenharia
 - Argilas bentoníticas e a absorção de metais tóxicos (pesados), dentre outros poluentes
 - Aplicações não mineralógicas:
 - a) Na atmosfera/estratosférica
 - b) Em cenários contaminados (herbicidas, pesticidas, fenois, hidrocarbonetos poliaromáticos, dioxinas, dibenzofuranos e policlorinados, óleos e graxas, dentre outros)
 - c) Nos solos
 - d) Em polímeros
- Aplicações nucleares:
 - Argilas como *backfill/coverage* em repositórios de rejeitos radiativos
 - Bentonitas como barreiras diferenciadas de radionuclídeos
 - Substâncias húmicas na adsorção de radionuclídeos
 - Bentonitas x substâncias húmicas na eficiência de barreiras de radionuclídeos
- Outras aplicações científicas e tecnológicas do infravermelho:
 - Matérias-primas na indústria cerâmica
 - Sensoriamento remoto
 - Ciência forense
 - Mineralogia astronômica
 - Controle de qualidade
- Vantagens e limitações da técnica

Módulo 4 - Aulas práticas

Duas aulas laboratoriais (em função da realidade frente à pandemia) no Centro Universitário Newton Paiva (Campus Buritis) em parceria com o Prof. Dr. Luciano Faria.

Referências Bibliográficas:

1) LIVROS (alguns exemplos):

ADAMIS, Zoltán; FODOR, József (2005) - Bentonite Kaolin and Selected Clay Minerals. World Health Organization 196p.

CHALMERS, John; GRIFFITHS, Peter (2002) - Handbook of Vibrational Spectroscopy. Vol 1. Theory and Instrumentation. Wiley.

CLAMERS, John M.; EDWARDS, Howell G.M.; HARGREAVES, Michael D. (2012) - Infrared and Raman Spectroscopy in Forensic Science.

FARMER V. C. (1974) - The Infrared Spectra of Minerals. Mineralogical Society Monograph 4. London. 539p.

GUPTA, Ravi P. (2018) - Remote Sensing Geology. Springer. 438p.

LARKIN, P. J. (2011) - Infrared and Raman spectroscopy: principles and spectral interpretation. Boston: Elsevier. 228p. ISBN 978-0-12-386984-5. Biblioteca CDTN 543.424.2 / L324i

MILOSEVIC, Milan (2012) – Internal reflection and ATR spectroscopy. Chemical Analysis - A series of monographs on analytical chemistry and its applications. Vol 176. John Wiley & Sons, Inc. 258p.

PUSCH, R. (2015) - Bentonite Clay - Environmental Properties and Applications. CRC Press. 368p.

PUSCH, R. (2008) - Geological Storage of Highly Radioactive Waste. Springer. 391p.

SMITH, Brian C. (2018) - Infrared Spectral Interpretation - A Systematic Approach. CRC Press. 282p.

SMITH, Brian C. (2011) - Fundamentals of Fourier Transform Infrared Spectroscopy. CRC Press. 198p.

STUART, B.H. 2004 – Infrared Spectroscopy. 208p

2) ARTIGOS CIENTÍFICOS (alguns exemplos):

ANIRUDHAN, T.S.; SUCHITHRA, P.S. (2010) - Heavy metals uptake from aqueous solutions and industrial wastewaters by humic acid-immobilized polymer/bentonite composite: Kinetics and equilibrium modeling. Chemical Engineering Journal 156: 146–156.

CHEN, Yonggui; ZHU, Baohui; WU, Dongbei; WANG, Qigang; YANG, Yuhui; YE, Weimin; GUO, Junfang (2012) - Eu(III) adsorption using di(2-thylhexyl) phosphoric acid-immobilized magnetic GMZ bentonite Chemical Engineering Journal 181– 182: 387– 396.

COX, R.J.; PETERSON, H.L.; YOUNG, J.; CUSIK, C.; ESPINOSA, E.O. (2000) - The forensic analysis of soil organic by FTIR. Forensic Science International, Vol. 108:107–116.

DONG, Yunhui; LIU, Zhengjie; LI, Yueyun (2011) - Effect of pH, ionic strength, foreign ions and humic substances on Th(IV) sorption to GMZ bentonite studied by batch experiments. J Radioanal Nucl Chem: 289:257–265.

- HAHN, Annette; VOGEL, Hendrik; ANDÓ, Sergio; GARZANTI, Eduardo; KUHN, Gerhard; LANTZSCH, Hendrik; SCHÜRMAN, Jan; VOGT, Christoph; ZABEL, Matthias (2018) - Using Fourier transform infrared spectroscopy to determine mineral phases in sediments. *Sedimentary Geology* 375. 27–35.
- HAYATI-ASHTIANI, Majid (2011) - Characterization of Nano-Porous Bentonite (Montmorillonite) Particles using FTIR and BET-BJH Analyses. *Part. Syst. Charact.* 28: 71–76.
- JIN, Xiaoying; ZHENG, Min; SARKAR, Binoy; NAIDU, Ravi; CHEN, Zuliang (2016) - Characterization of bentonite modified with humic acid for the removal of Cu (II) and 2,4-dichlorophenol from aqueous solution. *Applied Clay Science*, Volume 134, Part 2: 89-94.
- KAUFHOLD, S., HEIN, M., DOHRMANN, R., UFER, K. (2012) - Quantification of the mineralogical composition of clays using FTIR spectroscopy. *Vibrational Spectroscopy* 59, 29–39.
- KLINKENBERG, M.; DOHRMANN, R.; KAUFHOLD, S.; STANJEK, H. (2006) - A new method for identifying Wyoming bentonite by ATR-FTIR. *Applied Clay Science* 33, 195–206.
- MADEJOVÁ, J., (2003) - FTIR techniques in clay mineral studies. *Vibrational Spectroscopy* 31(1), 1–10.
- MÜLLER, Christian M.; PEJCIC, B.; ESTEBAN, Lionel; DELLE, C. (2014) - Infrared ATR Spectroscopy - An Innovative Strategy for Analyzing Mineral Components in Energy Relevant Systems. *Scientific Reports* 4: 6764. DOI: 10.1038/srep06764
- PSHINKO, G. N. (2009) - Impact of Humic Matter on Sorption of Radionuclides by Montmorillonite. *Journal of Water Chemistry and Technology*, Vol. 31, No. 3, pp. 163–171.
- SONGSHENG, Lu; HUA, Xu; MINGMING, Wang; XIAOPING, Song; QIONG, Liu (2012) - Sorption of Eu(III) onto Gaomiaozi bentonite by batch technique as a function of pH, ionic strength, and humic acid. *J Radioanal Nucl Chem* 292: 889–895.
- TAHER, Tarmizi; PALAPA, Neza Rahayu; MOHADI, Risfidian; LESBANI, Aldes (2019) - Adsorption behavior of Cr (VI) from aqueous solution by Fe-pillared acid activated Indonesian bentonite. *AIP Conference Proceedings* 2194, 020124; <https://doi.org/10.1063/1.5139856>
- TOMIC, Zorica P.; ASANIN, Darko P.; DUROVIC-PEJCEV, Rada; DORDEVIC, Aleksandar; MAKRESKI, Petre (2015) - Adsorption of Acetochlor Herbicide on Inorganic- and Organic-Modified Bentonite Monitored by Mid-Infrared Spectroscopy and Batch Adsorption. *Spectroscopy Letters*, 48: 685-690.
- VISSER, Tom (2006) - Infrared Spectroscopy in Environmental Analysis. *Encyclopedia of Analytical Chemistry* by John Wiley & Sons, Ltd.
- WANG, You-Qun; ZHANG, Zhi-bin; LI, Qin; LIU, Yun-Hai (2012) - Adsorption of uranium from aqueous solution using HDTMA+- pillared bentonite: isotherm, kinetic and thermodynamic aspects. *J Radioanal Nucl Chem*, 293:231–239.
- XIAO, Jiang; CHEN, Yuantao; ZHAO, Wenhua; XU, Jiangbo (2013) - Sorption behavior of U(VI) onto Chinese bentonite: Effect of pH, ionic strength, temperature and humic acid. *Journal of Molecular Liquids* 188: 178–185.
- ZORICA, P. TOMIC et al. (2015) - Adsorption of Acetochlor Herbicide on Inorganic and Organic-Modified Bentonite Monitored by Mid-IR Spectroscopy and Batch Adsorption. *Spectroscopy Letters*, 48: 685–690.

3) BIBLIOTECA DE ESPECTROS (impressos, digitais ou online):

CHUKANOV, Nikita V. (2014) - Infrared spectra of mineral species: Extended library [1 ed.]. Springer Geochemistry/Mineralogy. Springer Netherlands. 1686p.

CHUKANOV, Nikita V. (2014) - Infrared spectra of mineral species - IR Spectra of Minerals and Reference Samples Data. Springer Geochemistry/Mineralogy. Extended Library. Vol 2. Springer. 1.882p.

CHUKANOV, Nikita V.; CHERVONNYI, Alexandr D. (2016) - Infrared Spectroscopy of Minerals and Related Compounds. Springer Mineralogy ISBN 978-3-319-25347

CLARK, R.N.; SWAYZE, G.A.; WISE, R.; LIVO, E.; HOEFEN, T.; KOKALY, R.; SUTLEY, S.J. (2007) - USGS digital spectral library splib06a: U.S. Geological Survey. Digital Data Series: p. 231. <http://speclab.cr.usgs.gov/spectral.lib06>.

JONES, G.C.; JACKSON, B. (1993) - Infrared Transmission Spectra of Carbonate Minerals- Springer Netherlands.

MAREL, H.W. van der; BEUTELSPACHER, H. (1976) - Atlas of infrared spectroscopy of clay minerals and their admixtures. Elsevier, Amsterdam.

MOENKE, H. (1966) – Mineralspektren.

NYQUIST R. A.; KAGEL, R.O. (1971) – Infrared spectra of inorganic compounds. Academic Press.

SALISBURY, John W.; WALTER, Louis S.; VERGO, Norma; D'ARIA, Dana M. (1991) - Infrared (2.1-25 μm) Spectra of Minerals. Johns Hopkins University Press, 267p, CD-ROM.

USGS (1988) - Mid-Infrared (2,5 to 13,5 μm) spectra of igneous rocks. 87p. <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.877.6793&rep=rep1&type=pdf>

<https://www.weizmann.ac.il/kimmel-arch/infrared-spectra-library>

<https://spectrabase.com/>

<https://rruff.info/>

<http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php>