



### PLANO DE ENSINO – semestre 2016.1

<b>I. IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA</b>			
<b>CÓDIGO</b>	<b>NOME DA DISCIPLINA</b>	<b>Nº de Horas-Aula Semanais</b>	<b>Total de Horas/Aula Semestrais</b>
QMC 3111	Química Inorgânica Avançada	04	72

<b>II. HORÁRIO</b>
Terças-feiras 15:20 às 17:00 horas Quintas-feiras 15:20 às 17:00 horas

<b>III. PROFESSOR MINISTRANTE</b>
Prof. Ademir Neves

<b>IV. EMENTA</b>
Química de ácidos e bases duros e macios. Química em soluções aquosas e não aquosas. Elementos de simetria, operação de simetria. Grupo de ponto. Química de coordenação: Estrutura e Reatividade. Química dos compostos organometálicos. Química dos metais do bloco f.

<b>V. OBJETIVOS</b>
<p><u>Objetivo Geral:</u> Ao final do curso, o aluno deverá ser capaz de utilizar os fundamentos teóricos de química inorgânica no reconhecimento das propriedades estruturais e espectroscópicas de compostos de coordenação e organometálicos.</p> <p><u>Objetivos específicos:</u> Ao final do curso o aluno deverá ser capaz de:</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. Prever as reações químicas mais prováveis utilizando o conceito de ácidos e bases de Pearson.</li><li>2. Prever possíveis estruturas de compostos inorgânicos através do método "repulsão dos pares eletrônicos de valência".</li><li>2. Identificar modos vibracionais no infra-vermelho e Raman através de simetria molecular e teoria de grupo para os mais diversos tipos de compostos.</li><li>3. Utilizar as teorias de ligações (Teoria da Ligação de Valência - VB, Teoria do Campo Cristalino -CFT e Teoria dos Orbitais Moleculares - MO) na identificação da estrutura e propriedades magnéticas de compostos de coordenação.</li><li>4. Utilizar as teorias CFT e MO na identificação dos diversos tipos de transições eletrônicas em complexos de metais de transição e compostos organometálicos. Utilizar de forma adequada os os diagramas de Orgel e Tanabe-Sugano.</li><li>5. Prever a geometria/estrutura e propriedades eletrônicas de compostos organometálicos utilizando a Regra dos 18 elétrons e a teoria MO.</li><li>6. Identificar as configurações eletrônicas e estruturas de complexos formados com lantanídeos.</li></ol>

<b>VI. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO</b>
<p><b>1. Teoria de ácidos e bases de Pearson (HSAB).</b></p> <ol style="list-style-type: none"><li>1.1. Classificação de ácidos e bases de acordo com HSAB.</li><li>1.2. Previsão de reações químicas através da HSAB.</li></ol> <p><b>2. Simetria Molecular e Teoria de Grupo.</b></p> <ol style="list-style-type: none"><li>2.1. Elementos de simetria.</li></ol>



2.2. Operações de simetria e classificação dos grupos de ponto.

2.3. Princípios básicos de teoria de grupo e simetria molecular.

2.4. Tabelas de caracteres e a identificação de modos vibracionais no infra-vermelho e Raman.

### 3. Química de Coordenação.

3.1. A Teoria a Ligação de Valência (VB) e Paramagnetismo/Diamagnetismo.

3.1.1. Isomeria em compostos de coordenação. Isomeria geométrica e isomeria ótica. Dicroísmo Circular.

3.2. A Teoria do Campos Cristalino (CFT).

3.2.1. Complexos octaédricos (Oh) e tetraédricos (Td). A energia de estabilização do campo cristalino (CFSE). Distorções tetragonais a partir de geometria Oh. O teorema de Jahn-Teller e complexos quadrado-planares.

3.2.2. Fatores que afetam a CFSE e a Série Espectroquímica.

3.3. A Teoria dos Orbitais Moleculares (MO) e o Efeito Nefelauxético.

3.3.1. A Teoria MO em moléculas simples. A teoria MO em compostos de coordenação.

3.3.2. A teoria MO e ligações  $\pi$  (retrodoação).

3.3. Espectroscopia eletrônica em complexos de metais de transição.

3.3.1. Os estados atômicos e os Termos Símbolos. Momento angular do orbital e momento angular do spin – os microestados e o termo Russel-Saunders.

3.3.2. Derivação dos espectros para sistemas Oh e Td. Parâmetros de Racah. Os Diagramas de Orgel e Tanabe-Sugano. Regras de Seleção.

### 4. Compostos Organometálicos.

4.1. A Regra dos 18 elétrons e a teoria MO em compostos organometálicos.

### 5. A Química dos Lantanídeos – Uma visão Geral.

5.1. A formação de complexos com lantanídeos. Estrutura e propriedades eletrônicas.

## VII. METODOLOGIA DE ENSINO / DESENVOLVIMENTO DO PROGRAMA

Aulas teóricas com utilização de quadro negro/giz e multimídia. Lista de exercícios para cada capítulo ministrado em aula. Aulas de exercícios em grupo.

## VIII. METODOLOGIA DE AVALIAÇÃO

A avaliação será realizada através de três (03) provas escritas para as quais o conteúdo será cumulativo. A média final será a média aritmética das três provas.

## IX. BIBLIOGRAFIA BÁSICA

- 1) COTTON, F. A.; WILKINSON, G. *Advanced inorganic chemistry*. 5th ed. New York: John Wiley, 1988.
- 2) HUHEEY, J. E. *Inorganic chemistry: principles of structure and reactivity*. 4th ed. New York: Harper & Row, 1993.
- 3) Catherine E. Housecroft and Alan G. Sharpe, *Inorganic Chemistry*, 2<sup>nd</sup> Edition, 2005 Pearson Education Limited Edinburgh Gate, Harlow, Essex CM20 2JE England.



- 4) Gary L. Miessler and Donald A. Tarr. ***Inorganic Chemistry***, 3<sup>rd</sup> Edition, Publisher: Prentice Hall, October 3, 2003
- 5) Ulrich Muller, ***Inorganic Structural Chemistry***, 2<sup>nd</sup> Edition, John Wiley & Sons, Ltd, 2006.
- 6) James E. House, ***Inorganic Chemistry***, Elsevier Inc., 2008.