

DEPARTAMENTO: QUÍMICA

DISCIPLINA: Química Inorgânica Avançada

SIGLA: QIN-A

CARGA HORÁRIA TOTAL: 60 horas

TEORIA: 60 horas

PRÁTICA:

CURSO: Doutorado Acadêmico em Química Aplicada

PRÉ-REQUISITOS:

PROFESSOR RESPONSÁVEL: Karine Priscila Naidek e Fernando Roberto Xavier

EMENTA

- Química de ácidos e bases duros e macios.
- Simetria Molecular e Teoria de Grupo aplicada a Química.
- Química de coordenação: Estrutura e Reatividade.
- Espectroscopia eletrônica e vibracional de compostos de coordenação.
- Química dos compostos organometálicos.
- Química dos metais do bloco *f*.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

1. Química ácido-base doadora e receptora: 12h

- 1.1. Histórico dos conceitos de ácido e bases (Arrhenius; Brønsted-Lowry e Lewis).
- 1.2. Conceitos ácido-base e orbitais de fronteira.
- 1.3. Forças intermoleculares: ligação de hidrogênio e receptor-substrato.
- 1.4. Dureza e maciez de Pearson para as substâncias.

2. Simetria Molecular e Teoria de Grupo: 12h

- 2.1. Elementos de simetria.
- 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 infravermelho e Raman.

3. Química de coordenação: 16h

- 3.1. A Teoria da Ligação de Valência (VB): Para e diamagnetismo.
- 3.1.1. Isomeria geométrica e isomeria ótica. Dicroísmo Circular.
- 3.2. A Teoria do Campo 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 π (retrodoação).
3.4. Espectroscopia eletrônica em complexos de metais de transição.
3.4.1. Os estados atômicos e os Termos Símbolos. Momento angular do orbital e momento angular do spin – os microestados e o termo Russel-Saunders.
3.4.2. Derivação dos espectros para sistemas Oh e Td. Parâmetros de Racah. Os Diagramas de Orgel e Tanabe-Sugano. Regras de Seleção.

4. Compostos organometálicos: 08h

- 4.1. Histórico e definições.
4.2. Regra dos 18 elétrons.
4.3. Nomenclatura e hapticidade.
4.4. Ligantes típicos em química organometálica.
4.5. Aplicações em catálise e processos industriais.

5. Introdução à Química do bloco f: 08h

- 5.1. Orbitais *f* e estados de oxidação.
5.2. O fenômeno de contração lantanídica.
5.3. Propriedades espectroscópicas e magnéticas.
5.4. Aplicações.

BIBLIOGRAFIA

1. HOUSECROFT, C. E. *Química Inorgânica* – Volumes 1 e 2. 4ª ed. São Paulo: LTC, 2013, 1156 p.
2. MIESSLER, G.; FISCHER, P. J.; TARR, D. A. *Química Inorgânica*. 5a ed. São Paulo: Pearson Education, 2014, 672 p.
3. COTTON, F. A.; WILKINSON, G. *Advanced Inorganic Chemistry*, 6th ed. New York: John Wiley & Sons, 1999, 1376p.
4. COLTHUP, N. B.; DALY, L. H.; WIBERLEY, S. E. *Introduction to infrared and Raman spectroscopy*. 3rd ed. Massachusetts: Academic Press, 1990, 547 p.
5. COTTON, F. A., *Chemical Application of Group Theory*; 2. Ed. New York: Wiley Interscience, c1990, 480p.
6. CRABTREE, R. H. *The Organometallic Chemistry Of The Transition Metals*. 6th ed. New Haven, Connecticut: Wiley, 2014, 520p.
7. HUHEEY, J. E.; KEITER, E. A.; KEITER, R. L. *Inorganic Chemistry*. 2nd ed. New York: Harper Collins College Publishers. 1993, 964 p.
8. SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W. *Química Inorgânica*. 4ª ed. Porto Alegre: Bookman, 2008, 848 p.



UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS – CCT
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA – PPGQ

Centro de Ciências Tecnológicas – CCT
Rua: Paulo Malschitzki, 200 – Campus Universitário Prof. Avelino Marcante
Zona Industrial Norte – CEP: 89219-710
Fone: (47) 3481-7900
Joinville – Santa Catarina – Brasil