

QMC 865 - Disciplina de Química Inorgânica Avançada

[90 horas/06 créditos]

Ementa da Disciplina:

0 Estado Sólido. A Ligação Covalente. Métodos Experimentais para a Determinação da Estrutura Molecular. Mecanismos de Reações Inorgânicas. Química Descritiva dos Metais de Transição. Introdução a Ligantes e Complexos. Química de Coordenação. Química Organometálica. Catálise Homogênea com Complexos de Metais de Transição. Cadeias, Anéis, Poliedros e Clusters Metálicos.

Programa Detalhado:

I. 0 Estado sólido:

Imperfeições em cristais. Condutividade em sólidos iônicos. Forças de coesão em sólidos.

II. A Ligação Covalente:

Estrutura de moléculas: Teoria da Repulsão do Par Eletrônico na Camada de Valência – VESPR. Teoria dos orbitais moleculares. Comprimento de ligação: multiplicidade.

III. Métodos Experimentais para a Determinação da Estrutura Molecular:

Generalidades.

IV. Mecanismo de Reações Inorgânicas:

Exemplos de reações simples de compostos covalentes: inversão atômica. Pseudo-rotação de Berry. Substituição nucleofílica. Mecanismo de radicais livres.

V. Química Descritiva dos Metais de Transição:

Dependência do estado de oxidação: nulivalente e negativo. Comparações com dependência da configuração eletrônica:

VI. Introdução a Ligantes e Complexos:

Classificação de ligantes. Complexos clássicos e não-clássicos. Ligantes II-ácidos: CO como protótipo. Mecanismo sinérgico de ligação. Outros ligantes II-ácidos. Ligações múltiplas à metais.

VII. Química de Coordenação (A):

Teoria da ligação de valência. Teoria do campo cristalino: 10 Dq. Energia de estabilização - campos forte e fraco. Efeito do campo cristalino nas simetrias: tetraédrica, octaédrica e quadrada-plana, Teoria do orbital de valência: utilização da simetria de orbitais.

VIII. Química de Coordenação (B):

O efeito "trans" na síntese. Mecanismo do efeito "trans", Labilidade, inércia, estabilidade e instabilidade.

IX. Química Organometálica:

π -Complexos: metallocenos, complexos olefinicos. Sistemas com ligantes: carbeno, carbino e alquino. carbonilas e nitrosilas metálicas. Fragmentos isolobais, Teoria dos orbitais moleculares: regra dos 18 elétrons.

X. Catálise Homogênea com Complexos de Metais de Transição: Gás de síntese. oxosíntese: aldeídos e álcoois. Polimerização Ziegler-Natta,

XI. Cadeias, Anéis, Políedros e Clusters Metálicos:

Catenação Heterocatenação, Anéis: borazenos, fosfazenos. Compostos poliédricos. Boranos: diborano, tipos - closo, nido e aracno. Carboranos. Clusters metálicos com três centros: $[\text{ReCl}_3]_3$ - teoria dos orbitais moleculares.

LITERATURA:

1. J. E. Huheey, E. A. Keiter, R. A. Keiter, "Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity", 4th Edition, Harper & Row Publishers, New York, 1997.
2. F. A. Cotton & G. Wilkinson, "Advanced Inorganic Chemistry – A Comprehensive Text", John Wiley & Sons, New York, 6th Ed., 1999.
3. Duward F., Shriver P. W., Atkins Cooper & H. Langford, "Inorganic Chemistry", Oxford University Press, 1990.
4. Purcell F. K., Kotz C. J., " Instructor's resource guide to accompany chemistry & chemical reactivity", W. B, Saunders Company, 1991.
5. Smart L., Moore E., Solid State Chemistry: An Introduction, Chapman & Hall; 2nd edition, 1995.
6. Müller U., Inorganic Structural Chemistry, John Wiley & Sons; 1 edition, 1993.
7. J. Dupont, "Química Organometálica - Elementos do Bloco d" Porto Alegre, Bookman, 2005.