

QMC1804 – Química Inorgânica Avançada (Advanced Inorganic Chemistry)

PROGRAMA

UNIDADE 1 - ASPECTOS GERAIS DAS LIGAÇÕES QUÍMICAS

1.1 - Teoria de Lewis: Regra de Langmuir; Carga formal e estabilidade; Estereoquímica - Método VSEPR

1.2 - Teoria de ligação de valência: Hibridização e geometria; Regra de Bent; Expansão do octeto e uso dos orbitais d; Ligações múltiplas

1.3 - Teoria dos orbitais moleculares: Moléculas diatômicas homonucleares; Moléculas diatômicas heteronucleares; Moléculas poliatômicas; Orbitais de fronteira; Formação de bandas

UNIDADE 2 - LIGAÇÕES EM COMPOSTOS DE COORDENAÇÃO

2.1 - Estruturas eletrônicas: Dados termodinâmicos; Susceptibilidade magnética

2.2 - Teoria do campo ligante: Orbitais moleculares para complexos octaédricos, tetraédricos e quadráticos; Energia de estabilização do campo ligante; Interações doador-sigma, receptor-pi e doador-pi; Séries espectroquímica, nefelauxética e magnetoquímica

2.3 - Efeito Jahn-Teller

UNIDADE 3 - TERMODINÂMICA DA FORMAÇÃO DE COMPLEXOS

3.1 - Constantes de formação: Tendências nas constantes de formação sucessivas

3.2 - Efeito quelato e efeitos macrocíclicos

3.3 - Efeitos estéricos e eletrônicos

UNIDADE 4 - PROPRIEDADES MAGNÉTICAS

4.1 - Magnetismo clássico

4.2 - Contribuição orbital para o momento magnético: Contribuição do spin para o momento magnético; Acoplamento spin-órbita

4.3 - Compostos magneticamente não-diluídos

4.4 - Magnetos moleculares

UNIDADE 5 - Introdução à química organometálica

5.1 - Desenvolvimento histórico e tendências atuais

5.2 - Classificação dos compostos organometálicos

5.3 Nomenclatura atual

5.4 Denticidade x hapticidade

5.5 Regra dos 18 elétrons e estabilidade

SYLLABUS (English)

UNIT 1 - GENERAL ASPECTS OF CHEMICAL BONDS

1.1 - Lewis theory: Langmuir rule; Formal load and stability; Stereochemistry - VSEPR Method

1.2 - Valence binding theory: Hybridization and geometry; Bent rule; Octet expansion and use of orbitals d; Multiple connections

1.3 - Molecular orbital theory: Homonuclear diatomic molecules; Heteronuclear diatomic molecules; Polyatomic molecules; Border orbitals; Band formation

UNIT 2 - BONDING IN COORDINATION COMPOUNDS

2.1 - Electronic structures: Thermodynamic data; Magnetic susceptibility

2.2 - Ligand field theory: Molecular orbitals for octahedral, tetrahedral, and quadratic complexes; Ligand field stabilizing energy; Donor-sigma, receptor-pi and donor-pi interactions; Spectrochemical, nephrochemical and magnetochemical series

2.3 - Jahn-Teller Effect

UNIT 3 - THERMODYNAMICS OF COMPLEX FORMATION

3.1 - Formation constants: Trends in successive constants of formation

3.2 - The chelate effect and macrocyclic effects

3.3 - Steric and electronic effects

UNIT 4 - MAGNETIC PROPERTIES

4.1 - Classical magnetism

4.2 - Orbital contribution to magnetic moment: Spin contribution to magnetic moment; Spin-orbit coupling

4.3 - Magnetically undiluted compounds

4.4 - Molecular magnets

UNIT 5 - Introduction to organometallic chemistry

5.1 - Historical development and current trends

5.2 - Classification of organometallic compounds

5.3 Current nomenclature

5.4 Denticity x hapticity

5.5 Rule of 18 electrons and stability

BIBLIOGRAFIA

- MEISSLER, G. L.; FISCHER, P. J.; TARR, D. A.; **Química Inorgânica**, 5a Ed., Pearson, São Paulo, 2014.
- SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W.; **Química Inorgânica**, 4ª Ed., Bookman, Porto Alegre, 2008.
- TOMA, H. E.; **Coleção de Química Conceitual: Química de Coordenação, Organometálica e Catálise**, Vol. 4, Blucher, São Paulo, 2013.
- HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G.; **Química Inorgânica**, 4ª Ed., Vol. 1 e 2, LTC, Rio de Janeiro, 2013.
- HUHEEY, J. E.; KEITER, E. A.; KEITER, R. L.; **Inorganic Chemistry - Principles of Structure and Reactivity**, 4th Ed., Harper Collins College Publishers, New York, 1993.
- DOUGLAS, B.; McDANIEL, D.; ALEXANDER, J.; **Concepts and Models of Inorganic Chemistry**, 3rd Ed., Wiley, New York, 1994.
- KETTLE, S. F. A.; **Physical Inorganic Chemistry: A Coordination Chemistry Approach**, Oxford University Press, Oxford, 2000.
- ATKINS, P. W.; OVERTON, T.; ROURKE, J.; WELLER, M.; ARMSTRONG, F.; HAGERMAN, M.; **Shriver & Atkins' Inorganic Chemistry**, 5th Ed., OUP Oxford, Oxford, 2009.
- LAWRANCE, G. A.; **Introduction to Coordination Chemistry**, Wiley, Chichester, 2010.
- COTTON, F. A.; WILKINSON, G.; MURILLO, C. A.; BOCHMANN, M.; **Advanced Inorganic Chemistry**, 6th Ed., Wiley-Interscience, New York, 1999.
- Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.

BIBLIOGRAPHY

- MEISSLER, G. L.; FISCHER, P. J.; TARR, D. A.; **Química Inorgânica**, 5a Ed., Pearson, São Paulo, 2014.
- SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W.; **Química Inorgânica**, 4ª Ed., Bookman, Porto Alegre, 2008.
- TOMA, H. E.; **Coleção de Química Conceitual: Química de Coordenação, Organometálica e Catálise**, Vol. 4, Blucher, São Paulo, 2013.
- HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G.; **Química Inorgânica**, 4ª Ed., Vol. 1 e 2, LTC, Rio de Janeiro, 2013.
- HUHEEY, J. E.; KEITER, E. A.; KEITER, R. L.; **Inorganic Chemistry - Principles of Structure and Reactivity**, 4th Ed., Harper Collins College Publishers, New York, 1993.
- DOUGLAS, B.; McDANIEL, D.; ALEXANDER, J.; **Concepts and Models of Inorganic Chemistry**, 3rd Ed., Wiley, New York, 1994.
- KETTLE, S. F. A.; **Physical Inorganic Chemistry: A Coordination Chemistry Approach**, Oxford University Press, Oxford, 2000.
- ATKINS, P. W.; OVERTON, T.; ROURKE, J.; WELLER, M.; ARMSTRONG, F.; HAGERMAN, M.; **Shriver & Atkins' Inorganic Chemistry**, 5th Ed., OUP Oxford, Oxford, 2009.
- LAWRANCE, G. A.; **Introduction to Coordination Chemistry**, Wiley, Chichester, 2010.
- COTTON, F. A.; WILKINSON, G.; MURILLO, C. A.; BOCHMANN, M.; **Advanced Inorganic Chemistry**, 6th Ed., Wiley-Interscience, New York, 1999.
- Recent scientific articles on the subject published in journals in the area.