



UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

EMENTA E PLANO DE CURSO

DISCIPLINA	CÓDIGO	CARGA HORÁRIA	CRÉDITOS	PERÍODO
QUÍMICA INORGÂNICA AVANÇADA	SQUIM0088	90 h	06	ANUAL
PROFESSORES: Ana Paula de Melo Alves Guedes Fausthon Fred da Silva Júlio Santos Rebouças Maria Gardênnia da Fonseca			CURSO QUÍMICA – MESTRADO e DOUTORADO	
EMENTA Teoria de Grupo e Simetria. Ligações Químicas aplicada a Compostos Inorgânicos, de coordenação e sólidos: Modelo de Ligação de Valência; Teoria de Campo Cristalino; Teoria de Orbitais Moleculares. Cinética e mecanismos de reações inorgânicas; Organometálicos; Mecanismos de reação em Compostos Organometálicos; Ligação Iônica				
OBJETIVOS Este curso tem como objetivo apresentar conceitos clássicos de química inorgânica avançadas. Determinar o grupo pontual de diferentes espécies. Relacionar os grupos pontuais à diferentes sistemas. Aplicar a simetria e teoria de grupo para explicar a estrutura molecular e as características da matéria com ênfase nas teorias do campo cristalino, campo ligante e teoria dos orbitais moleculares. Prever os modos ativos e inativos em espectros vibracionais de diferentes compostos. Propor os mecanismos de reações inorgânicas tomando por base aspectos cinéticos e termodinâmicos, nomear compostos organometálicos e diferenciar as suas reações principais, avaliar o uso de compostos organometálicos e complexos em catálise.				
METODOLOGIA Aulas expositivas, estudos dirigidos, seminários				
RECURSOS DIDÁTICOS Quadro, data-show, computadores, videoconferências				
MODOS E MEIOS DE AVALIAÇÃO Os alunos são avaliados por meio de provas, listas de exercício, estudos dirigidos e/ou apresentação de seminários.				
CONTEÚDO PROGRAMÁTICO Teoria de Grupo e Simetria: Definição de Grupo, Subgrupo, Elementos Conjugados, Classes e Tabela de Multiplicação; Elementos e Operações de Simetria; Produto das Operações de Simetria e Tabela de Multiplicação; Os Grupos Pontuais; Matrizes e Operações de Simetria; Representações das Operações de Simetria; Construção e uso das Tabelas de Caracteres; Aplicações Gerais da Teoria de Grupo: Simetria dos Orbitais e Espectroscopia vibracional. Ligações Químicas Aplicada a Compostos Inorgânicos: Modelo de Ligação de Valência; Fundamentos; Tratamento de Heitler-London; Hibridização. Modelo dos Orbitais Moleculares; Simetria e Overlap de Orbitais; Aplicação da Teoria de Grupo na Combinação de Orbitais; Ligações Sigma e Pi; Orbitais Moleculares em Compostos contendo Elementos Representativos: Moléculas Diatômicas Homonucleares e Heteronucleares; Orbitais Moleculares para Moléculas Poliatômicas (diferentes simetrias, diagrama de correlação); Orbitais Moleculares para Cadeias de Átomos; Orbitais Moleculares para Moléculas em geral (Hipervalência, Deficiência de Elétrons); Orbitais Moleculares adaptados por Simetria; Orbitais Moleculares em Compostos de Coordenação. Teoria de Campo Cristalino. Ligação Iônica: Propriedades das Substâncias Iônicas; Ocorrência da Ligação Iônica; Estrutura das Redes Cristalinas– Sólidos Iônicos; Energia de Rede; Ciclo de Born-Haber; O Caráter Covalente em Ligações predominantemente iônicas. Cinética e mecanismos de reações inorgânicas: Reações de substituição em complexos quadráticos planos; Efeito trans e influência trans; Estabilidade termodinâmica e cinética em reações de substituição em complexos; Equilíbrio Químico e Efeito quelato, incluindo bases termodinâmicas e cinéticas; Substituição em complexos octaédricos; Mecanismos de reações redox; Catálise por complexos. Organometálicos: Regra dos 18 elétrons, Carbonilas metálicas, Complexos nitrosila; Hidretos, alquilas, carbenos e carbinos metálicos; Compostos com olefinas e alquinos coordenado; Metalocenos, Reações de compostos organometálicos; Mecanismos de substituição em compostos organometálicos; Catálise por complexos e compostos organometálicos.				



UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Huheey J. E., Keiter E. A. and Keiter R. L., Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity, 4a ed., Harper Collins, 1997.
- Douglas B. E., McDaniel D. H. and Alexander J. J., Concepts and models of Inorganic Chemistry, 3a ed., John Wiley & Sons: New York, 1994.
- Nascimento A. B., Elementos da Teoria de Grupo, apostila da UFPB, 1981.
- Davdson G., Group Theory for Chemistry, Macmillan, 1991.
- Carter R. L., Molecular Symmetry and Group Theory, John Wiley & Sons: New York, 1997.
- Cotton F. A., Chemical Applications of Group Theory, 3a ed., John Wiley & Sons: New York, 1990.
- Dekoch R. L. and Gray H. B., Chemical Structure and Bonding, Science Books, California, 1989.
- Barrett J., Structure and Bonding (Basic Concepts in Chemistry), Wiley-RSC, London, 2002.
- Ogden J. S., Introduction to Molecular Symmetry, Oxford University Press, New York, 2001.
- Vincent A., Molecular Symmetry and Group Theory: A Programmed Introduction to Chemical Applications, 2a ed., John Wiley & Sons: New York, 2005.
- Artigos da literatura.

LOCAL		
JOÃO PESSOA-PB	PPGQ	UFPB