

Química Inorgânica

Créditos: 04

Carga Horária: 60 horas

Ementa: Teoria de Grupo e Simetria. Ligações Químicas aplicada a Compostos Inorgânicos. Modelo de Ligação de Valencia; Fundamentos; Tratamento de Heitler-London; Hibridização. Modelo dos Orbitais Moleculares; Orbitais Moleculares de Moléculas Diatômicas; Orbitais Moleculares para Moléculas Poliatômicas e para Sólidos; Orbitais Moleculares para Cadeias de Átomos; Orbitais Moleculares em Compostos de Coordenação. Ligação Iônica; Estrutura das Redes Cristalinas – Sólidos Iônicos; Ciclo de Born-Haber.

Programa:

1. Teoria de Grupo e Simetria

- Definição de Grupo, Sub-grupo, 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.

2. Ligações Químicas Aplicada a Compostos Inorgânicos

- Modelo de Ligação de Valencia;
- 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 e Sólidos - (H_3 e H_3^+ : 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;
- Diagrama de Walsh para H_2X ;
- Orbitais Moleculares em Compostos de Coordenação.

3. Ligação Iônica

- Propriedades das Substâncias Iônicas;
- Ocorrência da Ligação Iônica;
- Estrutura das Redes Cristalinas–Sólidos Iônicos;
- Energia de Rede;
- Ciclo de Born-Haber;
- Efeitos do Tamanho: Raio Iônico, Eficiência do Empacotamento e Redes Cristalinas;

- O Caráter Covalente em Ligações predominantemente Iônicas.

Referências Bibliográficas:

- Huheey J. E., Keiter E. A. and Keiter R. L., **Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity**, 4^a ed., Harper Collins, 1997.
- Douglas B. E., McDaniel D. H. and Alexander J. J., **Concepts and models of Inorganic Chemistry**, 3^a 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**, 3^a 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**, 2^a ed., John Wiley & Sons: New York, 2005.
- Artigos recentes da literatura.