

## SÚMULA DA DISCIPLINA

### 1. Identificação

Código e nome da disciplina: QUP 301 – Química Inorgânica Avançada

Professores responsáveis: Maria do Carmo Martins Alves, Jackson Damiani Scholten

Nível: Mestrado e Doutorado

Carga horária: 45 h

Créditos: 3 (três)

Revisado e atualizado em: Agosto\_2019

### 2. Ementa

Simetria molecular e teoria de grupos. Teorias de ligação em compostos de coordenação. Estabilidade e aspectos termodinâmicos de compostos de coordenação.

### 3. Objetivo

Introdução dos conceitos de simetria e de teoria de grupo como ferramentas para estudar a ligação química em moléculas e complexos de metais de transição.

### 4. Conteúdo Programático

Definições e teoremas da teoria de grupos. Simetria molecular e grupos de ponto. Representações de grupos. Técnicas e relações para aplicações em química. Formulação de orbitais híbridos. Cálculo das combinações lineares de orbitais adaptados à simetria com o uso do operador projeção para ligações sigma e pi.

Histórico das teorias de ligação em compostos de coordenação. Teoria da ligação de valência, teoria do campo cristalino, teoria do orbital molecular. Estabilidade termodinâmica de compostos de coordenação.

### 5. Avaliação

A avaliação consistirá de duas provas teóricas P1 e P2 de mesmo peso e de um seminário (S). Os alunos com média simples ( $M = (P1+P2)/2$ ) inferior à 6,0 deverão realizar um exame (E) de todo o conteúdo ministrado. A nota final (NF) será calculada pela equação:  $NF = 0,6M + 0,4S$ . Para os alunos que realizarem o exame (E) a nota final (NF) será calculada conforme a equação: Média das Provas final (MPF) será calculada pela relação:  $MPF = 0,4M + 0,6E$ , onde  $NF = 0,6MPF + 0,4S$ . Será considerado aprovado o aluno que obtiver conceito final A, B ou C, atribuídos conforme relação abaixo:

A - Ótimo (90 a 100%)

B - Bom (75% a 89%)

C - Regular (60 a 74%)

D - Insuficiente (abaixo de 60%)

FF - Sem frequência

### 6. Método de Trabalho/Ensino

Aulas teórico-expositivas.

## 7. Bibliografia

- R. L. Carter, Molecular Symmetry and Group Theory, John Wiley & Sons, Inc. 1998.
- F. A. Cotton, Chemical Applications of Group Theory. New York: Wiley Interscience, 1990.
- G. L. Miessler, P. J. Fischer e D. A. Tarr, Inorganic Chemistry, 5th ed. Upper Saddle River: Pearson, 2014.
- D. J. Willock, Molecular Symmetry, John Wiley & Sons Ltd, Wiltshire, 2009.
- B. Douglas, D. Mc Daniel e J. Alexander, Concepts and Models of Inorganic Chemistry, 2ª Ed. New York: John Wiley & Sons, 1997.
- D. Shriver; P. Atkins e T. Overton, Inorganic Chemistry - Fourth Edition, Oxford, 2006.
- S. F. A. Kettle, Physical Inorganic Chemistry: A coordination chemistry approach. Oxford. Oxford University Press, 1998.
- R. S. Drago, Physical Methods in Chemistry, Saunders, 1977.
- I. S. Butler e J. F. Harrod, Inorganic Chemistry, Principles and Applications. USA: The Benjamin/Cummings Publishing Company, 1989.
- C. E. Housecroft e A. G. Sharpe, Inorganic Chemistry, Harlow Pearson Education, 2008.
- D. A. McQuarrie e J. T. S Dimon, Physical Chemistry: A molecular approach, University Science Books, 1997.
- Referências de periódicos especializados.