

SÚMULA DA DISCIPLINA ENSINO REMOTO EMERGENCIAL

1. Identificação

Nome disciplina: QUP 301 - Química Inorgânica Avançada

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

Nível: Mestrado e Doutorado

Carga horária: 45

Créditos: 3

Revisado e atualizado em: Junho_2020

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. Os alunos com média simples ($M = (P1+P2)/2$) inferior a 6,0 deverão realizar um exame (E) de todo o conteúdo ministrado. A nota final (NF) será calculada pela média simples (M) das notas das provas das duas áreas. Para os alunos que realizarem o exame (E) a nota final (NF) será calculada conforme a equação: $NF = 0,4M + 0,6E$. 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

Durante o período de exceção devido à COVID-19 as aulas serão ministradas utilizando o Ensino Remoto Emergencial (ERE) através do serviço de web conferência Mconf da UFRGS, em

endereço a ser divulgado antecipadamente aos estudantes, no ambiente virtual de aprendizagem Moodle Acadêmico. Caso o serviço Mconf apresente desempenho insuficiente, as aulas ocorrerão através de outro serviço livre disponível. No Moodle será disponibilizada a agenda da disciplina, referências bibliográficas, listas de exercícios, slides de aula. Estão previstas pelo menos três reuniões virtuais no decorrer do curso, a primeira aula para apresentação da disciplina e as outras duas reuniões serão utilizadas para esclarecimento de dúvidas. A frequência dos estudantes nessas aulas será verificada através da lista de participantes na aula.

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.
- James E. Huheey, Inorganic Chemistry : Principles of Structure and Reactivity, 4ª. Ed. New York: Harper Collins, c1993.
- 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.