



**PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS**

<b>Disciplina</b>	
<b>Código</b>	<b>Nome</b>
QI145	Interações Químicas

<b>Vetor</b>
OF:S-5 T:002 P:000 L:000 O:002 D:000 HS:004 SL:002 C:004 AV:N EX:S FM:75%

<b>Pré-Req</b>	QG108
----------------	-------

<b>Ementa</b>
Teoria dos orbitais moleculares para moléculas poliatômicas. Introdução à teoria de grupo. Ácidos e bases.

<b>Programa</b>
<b>Orbitais Moleculares</b> Introdução à teoria de grupo: simetria, grupos pontuais e utilização da tabela de caracteres na classificação de moléculas e orbitais. Orbitais moleculares adaptados por simetria. Teoria dos Orbitais Moleculares para moléculas poliatômicas (espécies simples: H3 e H3+, H2O, NH3 e Diagrama de Walsh para moléculas EH2); Orbitais moleculares para cadeias de átomos, moléculas hipervalentes, moléculas com ligação $\pi$ e deficiente de elétrons (exemplos: SF6, fragmento B-H-B de boranos, NO2-).
<b>Ácidos e Bases</b> Acidez de Bronsted: H+ em H2O; ácidos e bases conjugadas; acidez e basicidade de solventes. Tendências periódicas na acidez de Bronsted: aqua-ácidos; oxo-ácidos (Regra de Pauling); óxidos anidros; anfoterismo. Ácidos e bases de Lewis: tendências periódicas; exemplos de reações como: formação de aduto, correlacionando com o orbital molecular; reações de deslocamento; metátese. Considerações estruturais e fatores estéricos na força de ácidos e bases nas diversas teorias. Ácidos e bases duros e moles (incluindo bloco f). A interpretação de dureza/moleza e a utilidade deste conceito. Acidez de superfície, por exemplo: sílica, alumina, aluminossilicatos. Conceito generalizado de ácidos e bases. Hidretos – tendências periódicas.

<b>Bibliografia</b>
<b>Bibliografia Básica</b> C. E. Housecroft, A. G. Sharpe. Inorganic Chemistry. 4th ed. Upper Saddle River. NJ : Prentice-Hall, 2012. 754p. G. L. Miessler, D. A. Tarr. Inorganic Chemistry. 4th ed., Harlow : Pearson, 2011. 1213p. D. F. Shriver, P. W. Atkins, C.H. Langford. Inorganic Chemistry. 2nd. ed. Oxford : Oxford University Press, 1994. 819p.
<b>Bibliografia Complementar / Avançada</b> J. E. Huheey, E. A. Keiter, R. L. Keiter. Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity. 4th ed. New York :

Harper Collins, 1993. 964p.

S. F. A. Kettle. Symmetry and Structure: (Readable Group Theory for Chemists). 2nd ed. Chichester : John Wiley, 1995.

416p.

F. A. Cotton. Chemical Applications of Group Theory. 3th ed. New York: John Wiley, 1990. 461p.

G. M. Oliveira. Simetria de Moléculas e Cristais: Fundamentos da Espectroscopia Vibracional. Porto Alegre : Bookman, 2009.269p.

#### **Critérios de Avaliação**

Critérios de avaliação definidos pelo Professor, com base no disposto na Seção I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliação do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduação. Frequência: 75 % (\* O abono de faltas será considerado dentro do previsto no capítulo VI, seção X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduação)