



**PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS**

<b>Disciplina</b>	
<b>Código</b>	<b>Nome</b>
QI242	Química Inorgânica Teórica

<b>Vetor</b>
OF:S-2 T:004 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:004 SL:004 C:004 AV:N EX:S FM:75%

<b>Pré-Req</b>
QG101 QG102/QG108 QG109

<b>Ementa</b>
Estrutura Atômica. Periodicidade. Modelos de ligações químicas. Conceitos de acidez e basicidade. Compostos de coordenação. Introdução a compostos organometálicos e à catálise.

<b>Programa</b>
<b>Estrutura Atômica e Tabela Periódica (Revisão)</b> Modelos de Ligações Químicas Curva de energia potencial e formação de ligação química entre dois átomos de hidrogênio. Ligação iônica e o conceito de estabilização de rede. Ligação Covalente. Correção do modelo iônico e o conceito de Polarizabilidade. Correção do modelo covalente e o conceito de Eletronegatividade. Teoria dos Orbitais Moleculares. Ligações secundárias. Ligações metálicas. Modelo de bandas. Introdução aos conceitos de materiais isolantes, condutores e semicondutores.
<b>Introdução à Química do Estado Sólido</b> Celas unitárias. Retículos de Bravais. Empacotamento compacto. Interstício tetraédrico e octaédrico e introdução ao conceito de ligas. Introdução à Difração de Raios X.
<b>Ácidos e Bases</b> Conceito e definição de ácido e base de Lewis. Conceitos de ácidos duro e mole e a utilidade destas definições.
<b>Química de Coordenação</b> Definição de compostos de coordenação. Efeito quelato. Isômeros estruturais e estereoisômeros. Teoria do campo cristalino. Teoria do campo ligante. Efeito Jahn-Teller. Reatividade de compostos de coordenação; mecanismos de reação de substituição de ligantes; Efeito e influência trans; Mecanismos de reações de oxidação-redução.
<b>Introdução à Química de Organometálicos e à Catálise</b> Conceitos, definições e principais ligantes (M-CO e M-PR <sub>3</sub> ). Regra dos 18 elétrons. Aspectos termodinâmicos e cinéticos dos mecanismos das reações de substituição, adição oxidativa e eliminação reductiva. Apresentação de exemplos de catálise por organometálicos e de ciclos catalíticos comercialmente importantes.

<b>Bibliografia</b>
Bibliografia Básica

D. F. Shriver, P. W. Atkins, C.H. Langford. Inorganic Chemistry. 2nd. ed. Oxford : Oxford University Press, 1994. 819p. J. E. Huheey, E. A. Keiter, R. L. Keiter. Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity. 4th ed. New York : Harper Collins, 1993. 964p.  
Bibliografia Complementar  
G. L. Miessler, D. A. Tarr. Inorganic Chemistry. 4th ed., Harlow : Pearson, 2011. 1213p. C. E. Housecroft, A. G. Sharpe. Inorganic Chemistry. 4th ed. Upper Saddle River. NJ : Prentice-Hall, 2012. 754p.

#### **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)