



QUÍMICA INORGÂNICA AVANÇADA

Código: PQ307

Área de Concentração: Química

Carga Horária: 60 H

Créditos: 4

Responsável: Antonio Otavio de Toledo Patrocínio

Objetivos:

Aprofundamento dos conceitos essenciais em Química Inorgânica com ênfase nas estruturas atômica e molecular na aplicação dos conceitos de simetria para o entendimento das ligações químicas dos compostos inorgânicos.

Ementa:

1. Átomos e moléculas.
 - 1.1. A estrutura do átomo.
 - 1.2. O átomo de Hidrogênio.
 - 1.3. O átomo polieletrônico.
2. Introdução á simetria molecular.
 - 2.1. Operações de simetria.
 - 2.1. Elementos de simetria.
 - 2.2. Teoria de Grupo e simetria molecular.
3. Modelos de Ligação em Química Inorgânica: Compostos iônicos.
 - 3.1. A ligação iônica.
 - 3.2. Energia de rede: o ciclo de Born-Haber.
 - 3.3. Energia de rede: valores calculados *versus* valores experimentais.
 - 3.4. Efeito do tamanho dos íons.
 - 3.5. Estrutura cristalina dos sólidos iônicos.
 - 3.6. Aplicações das energias de rede.
4. Modelos de Ligação em Química Inorgânica: Compostos Covalentes.
 - 4.1. Teoria de Ligação de Valência: hibridização de orbitais atômicos.
 - 4.2. Teoria do orbital molecular: moléculas diatômicas homonucleares e heteronucleares.
 - 4.3. Teoria dos orbitais moleculares: aplicação para moléculas triatômicas e poliatômicas.
 - 4.4. Comparação das teorias do orbital molecular e teoria de ligação de valência.
5. Interações intermoleculares.
 - 5.1. Tipos de forças intermoleculares.
 - 5.2. Ligações de Hidrogênio.
 - 5.3. Efeitos das forças intermoleculares.
6. O estado sólido.
 - 6.1. A estrutura dos sólidos.
 - 6.2. Imperfeições na rede cristalina: defeitos de Schottky e defeitos de Frenkel.
 - 6.3. Ligação em metais e semicondutores.



- 6.4. Condutividade elétrica e resistividade.
- 6.5. Teoria de bandas: metais, semicondutores e isolantes.
- 6.6. Semicondutores intrínsecos e extrínsecos.
- 7. Ácidos, bases e íons em solução aquosa.
 - 7.1. Propriedades da água.
 - 7.2. Conceito ácido e base.
 - 7.3. Ácidos e bases inorgânicos.
 - 7.4. Força ácido e base em solução aquosa.
 - 7.5. Ácidos e bases duros e moles.

Bibliografia:

1. J. E. HUHEEY, E. A. KEITER and R. L. KEITER; Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity, 4th Edition, HarperCollins College Publishers (1993).
2. G. L. MIESSLER, P. J. ISCHER, D. A. TARR. Química Inorgânica, 5ª edição (2014)
3. C. HOUSECROFT and A. G. SHARPE; Química Inorgânica, 4ª edição (2013).
4. D. C. HARRIS and M. D. BERTOLUCCI; Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy, New York: Dover Publications (1989).
5. B. E. DOUGLAS, D. H. MCDANIEL and J. J. ALEXANDER, Concepts and Models of Inorganic Chemistry, 3th Edition, Wiley (1994).
6. F. A. COTTON, G. WILKINSON, C. A. MURILLO AND M. BOCHMANN; Advanced Inorganic Chemistry, 6th Edition, John Wiley & Sons (1999).
7. D.F. SHRIVER, P.W. ATKINS and C. H. LANGFORD; Química Inorgânica, 3a Edição (2003).