



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Campus Universitário-Trindade - 88040-900 - Florianópolis - SC - Brasil
Fone: (048) 3721-6852 - Fax: +55 48 3721 6852 - E-mail: secretar@qmc.ufsc.br

DISCIPLINA: Química de Coordenação

CÓDIGO: QMC 5123

CARGA HORÁRIA: 72 HORAS/AULA

CURSO: Química Bacharelado

PRÉ-REQUISITO:

EMENTA

Introdução à teoria de grupo aplicada à Química: espectroscopia eletrônica e vibracional em compostos de coordenação. Introdução à Química de coordenação. Teorias do campo cristalino e do campo ligante. Teoria dos orbitais moleculares. Isomeria. Estudo de equilíbrio dos complexos. Química dos compostos organometálicos. Mecanismos de reações inorgânicas

PROGRAMA

1. Simetria - Introdução a teoria de grupo
 - . Elementos de simetria - Grupos de ponto.
 - . Operações de simetria - Representações irredutíveis.
 - . Representação de Mülliken - A, E, T.
 - . Redução de caracteres.
 - . Espectroscopia de infra-vermelho e de Raman vibracional
2. Teoria do campo cristalino e campo ligante
 - . Simetria octaédrica.
 - . EECC.
 - . Magnitude de Δ_o , energia de emparelhamento.
 - . Simetria tetraédrica.
 - . Simetria tetragonal: complexos quadrados planares.
 - . Fatores que afetam a magnitude de Δ .
 - . Série espectroquímica.
3. Teoria do orbital molecular (TOM)
 - . Introdução: magnetismo das moléculas.
 - . TOM de complexos octaédricos.
 - . Ligantes π ácidos e básicos

- . Uso de simetria na identificação dos grupos de orbitais ligantes (GOL) envolvidos em ligações δ (sigma) e π (pi).
- . Ligações δ e π (diagramas de OM).
- . Microestados (termo símbolo de estado fundamental).
- . Diagrama de Orgel
- . Transições eletrônicas em Complexos octaédricos.
- . Regras de seleção
- . Diagramas de Tanabe-Sugano (uso de simetria)
- . Espectros eletrônicos: atribuições às transições; determinação de Δ_o e B' .
- . Distorção tetragonal a partir de complexos octaédricos:
- . Efeito de ligantes quelantes
- . Substituição de ligantes
- . Efeito Jahn - Teller.

4. Isomeria

- . Estereoisomerismo
- . Geométrico: cis/trans; fac/mer
- . Ótico: enantiômeros, diastereoisômeros
- . Propriedades físicas
- . Rotação ótica
- . Configuração absoluta (Λ e Δ)
- . Conformação do anel quelato (λ e δ)

5. Equilíbrio em complexos

- . Labilidade e Inércia
- . Estabilidade e Instabilidade
- . Efeito quelato

6. Introdução a mecanismos de reações de substituição e Redox em Complexos octaédricos: aspectos de cinética e termodinâmica.

- . Associativo (A) e dissociativo (D).
- . Introdução a reatividade - complexos lábeis/inertes.

7. Complexos organometálicos: Regras dos 16 e 18 elétrons; Síntese e aplicações de organometálicos.

BIBLIOGRAFIA

1. COTTON, F.A., WILKINSON, G. e GAUS, P.L., "Basic Inorganic Chemistry", John Wiley & Sons, 3^a ed., 1995.
2. COTTON, F.A. e WILKINSON, G., "Advanced Inorganic Chemistry", John Wiley & Sons, 5^a ed., 1988.

3. **SHRIVER, D.F., ATKINS, P.W., Inorganic Chemistry Oxford, 3ª Edição.1999. (LIVRO TEXTO)**
4. **HUHEEY, J.E., KEITER, E.A. e KEITER, RI, Inorganic Chemistry, Principles of Structure and Reactivity, 4ª ed., Harper Collins, 1993.**
5. NAKAMOTO, K., Infrared and Raman Spectro of Inorganic and Coordination Compounds, John Wiley & Sons, 1985.
6. DOUGLAS, B., McDANIEL, D. E., ALEXANDER, J., Concepts and Models of Inorganic Chemistry, 3ª Ed., John Wiley & Sons, N. Y., 1994.
7. Revistas científicas: Inorg. Chem. Acta; J. Chem. Ed.; Inorg. Chem. etc