

IQU-849 Química de Complexos (60 horas)

Ementa:

Origens históricas do estudo de complexos: a Teoria de Werner e a constituição e estrutura dos complexos metálicos. A Teoria das Ligações de Valência aplicada aos complexos metálicos; suas vantagens e limitações. A Teoria dos Campos Cristalinos: campos octaédricos e tetraédricos, cálculos da energia de estabilização do campo cristalino (EECC), fatores que afetam o valor de Dq , evidências termoquímicas, espectroscópicas e cristalográficas para a EECC. Campos de outras simetrias: complexos tetragonais, quadráticos e outros menos comuns; a distorção tetragonal oriunda de efeitos químicos e eletrônicos; o efeito Jahn-Teller. Limitações da Teoria dos Campos Cristalinos: o caráter covalente das ligações químicas em complexos e o efeito nefelauxético. A Teoria dos Orbitais Moleculares aplicada aos complexos metálicos: diagramas de energia para sistemas σ . Ligações π em complexos: simetria de orbitais, diagramas de energia, competição de ligantes por retrodoação π , evidências experimentais. espectroscopia eletrônica de complexos: diagramas de Orgel e de Tanabe-Sugano. Propriedades magnéticas dos complexos metálicos. Química descritiva de complexos metálicos: números de coordenação de 2 a 12. O efeito quelato. Isomeria em complexos metálicos: geometria, óptica, de ligação, e outras. Reações, cinética e mecanismos para complexos metálicos: reações associativas e dissociativas. A influência e o efeito *trans*. Reações de esfera externa e de esfera interna.

Referências:

1. J. E. Huheey; E. A. Keiter; R. L. Keiter, Inorganic Chemistry - Principles of Structure and Reactivity, Harper-Collins, 4^o Ed, 1993.
2. F. A. Cotton; G. Wilkinson. Advanced Inorganic Chemistry, Wiley-Interscience, 5^o Ed., 155 pp., 1988.
3. S. F. A. Kettle, Physical Inorganic Chemistry - A Coordination Chemistry Approach, Spektrum, 490 pp., 1996.
4. A. B. P. Lever. Inorganic Electronic Spectroscopy, Elsevier, 2^o Ed., 864 pp., 1984.
5. P. Atkins; T. Overton; J. Rourke; M. Weller; F. Armstrong; S. Atkins. Química Inorgânica, 4^o Ed., Bookman, 2008.
6. D.C. Harris; M.D. Bertolucci. Symmetry and Spectroscopy – An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy, Oxford University Press, 550 pp., 1978.
7. J.G. Ribas. Coordination Chemistry, Wiley, 2008.
8. R.G. Wilkins, Kinetics and Mechanism of Reactions of Transition Metal Complexes, 2^o Ed., VCH, 1991.