

Conteúdo

0	Introdução	2
1	Programa	2
2	Química Inorgânica	3
B	Background	4
1	Reações Ácidos-Base de Lewis	4
2	Ligações Covalentes Coordenadas	4
3	Ligações σ	4
1	Complexos e Compostos de Coordenação	5
1	Complexos de Coordenação	5
1.1	Compostos de Coordenação	5
1.2	Estrutura de um Complexo de Coordenação	5
1.3	Características	6
1.4	Exemplos:	7
2	Regras de Nomenclatura: Complexos de Coordenação	8
2.1	Estrutura	8
2.2	Regras	8

0 | Introdução

1 Programa

1. Interesse da Química Inorgânica.
2. Definições
 - Composto de Coordenação
 - Elemento Central
 - Ligando
 - Número de coordenação
 - Esfera de coordenação
3. Tipos de Ligandos.
4. Regras de nomenclatura dos Complexos de Coordenação
5. Afinidade de metais para ligandos.
6. Classificação de HSAB.
7. Estabilidade de compostos de coordenação.
8. Efeito de quelatação.
9. Números de coordenação mais prováveis em compostos de coordenação.
10. Isomeria.
11. Teorias de ligação química em compostos de coordenação.

12. Teoria do Enlace de Valência.
13. Teoria do Campo Cristalino.
14. Interpretação de propriedades
 - Magnéticas,
 - Espectros electrónicos
 - Propriedades termodinâmicas.
15. Diagramas de Orgel e Tanabe-Sugano.
16. Reactividade Química de Complexos.

2 Química Inorgânica

A química se divide em dois ramos, química orgânica e inorgânica. Química inorgânica compreendem todos os compostos que não possuem ligações de carbono do tipo C-H

B | Background

- 1 Reações Ácidos-Base de Lewis
- 2 Ligações Covalentes Coordenadas
- 3 Ligações σ

1 | Complexos e Compostos de Coordenação

1 Complexos de Coordenação

São produtos de reações ácido-base de Lewis onde um ou mais átomos / elementos centrais, geralmente átomos metálicos, se ligam a um arranjo de ligandos por **ligações covalentes coordenadas**.

Para ser considerado um complexo de coordenação, se deve ter o índice de coordenação superior a seu estado de oxidação

1.1 Compostos de Coordenação

Compostos que possuem complexos de coordenação.

Compostos de coordenação e complexos são espécies químicas distintas, suas propriedades e comportamentos químicos são diferentes dos seus componentes

1.2 Estrutura de um Complexo de Coordenação



A. Átomo / Elemento Central

B. Ligandos

C. Carga do complexo de coordenação

1.3 Características

Átomo / Elemento Central

Elemento metálico que ocupa o centro do complexo, considerado ácido de Lewis, existem complexos com múltiplos átomos / elementos centrais.

Ligandos

Elementos diretamente ligados ao elemento central, de natureza iônica ou molecular, são considerados bases de Lewis

Índice / Número de Coordenação

É o número de ligações σ entre os ligandos e o elemento central

Estado de Oxidação

Carga do elemento central representado em números romanos.

É definido como a carga que o átomo central teria se todos seus ligandos e pares eletrônicos compartilhados fossem removidos

Quelação e Ligandos Polidentados

Ligandos podem formar mais de uma ligação com o átomo central, formando um, ou mais anéis quelatos.

O número de átomos de um ligando que se ligam ao mesmo tempo com o átomo central é indicado pelos adjetivos: **B**identado; **T**ridentado; **T**etradentado; **P**entadentado; ...

Exemplos de ligandos polidentados:

- SO_4^{2-} : Bidentado instável
Sulfato
- $\text{C}_2\text{H}_4(\text{NH}_2)_2$: Bidentado
Etilenodiamina \rightarrow Etilenodiamino (en)
- $\text{C}_2\text{O}_4^{2-} = (\text{CO}_2)_2^{2-}$: Bidentado
Oxalato \rightarrow Oxalato

- $C_{10}H_8N_2$: Bidentado
Dipiridina \rightarrow Bpiridino (bipy)
- $CH_3COCHCOCH_3^-$: Bidentado
Acetilacetato \rightarrow Acetilacetato (ACAC)
- $OCC(CH_3)_3CHCOC_3F_7$: Bidentado
Heptafluoro dimetil octanedionato (fod)
- $C_{12}H_8N_2$: Bidentado
Fenatrolina \rightarrow Fenatrolina (phen)
Garante grande estabilidade, também é conhecido por emitir luz
- diaza-18-crown-6 = $C_{12}H_{26}N_2O_4$: Hexadentado
diaza-18-crown-6
Forma um anél que rodeia todo o perímetro do átomo central o garantindo grande estabilidade
- $C_{10}H_{16}N_2O_8 = (C_2OOH)_2NC_2N(C_2OOH)_2$: Hexadentado
etileno diamino tetra acetato \rightarrow etileno diamino tetra acetato (EDTA)
- $C_{14}H_{23}N_2O_{10}^{5-} = (C_2OOH)N(C_2N(C_2OOH)_2)_2^{5-}$: Octadentado
dietileno triamino penta acetato \rightarrow dietileno triamino penta acetato (DTPA)

Ligandos Ambidentados Alguns ligandos polidentados podem fazer apenas algumas de suas ligações por vês com o elemento central, esses são caracterisados como ambidentados. por possuírem essa característica, sua presença em um complexo o atribui isomeria de ligação

Exemplos de Ligandos Ambidentados

- SCN^- / NCS^- : Tiocianato / Isotiocianato
- NO_2^- / ONO^- : Nitro / Nitrito

1.4 Exemplos:

- $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$
- $[\text{Pt}(\text{CN})_4]^{-2}$
- $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{+3}$
- $[\text{Fe}(\text{CO})_5]$
- $[\text{Cl}_3\text{BNH}_3]$
- $[\text{Ni}(\text{CO})_4]$

2 Regras de Nomenclatura: Complexos de Coordenação

2.1 Estrutura



A. Nome do elemento central

B. Nome dos ligandos

2.2 Regras

- | | |
|---|--|
| 1. Complexos Aniônicos | 7. Aniões terminados em “ato” |
| 2. Múltiplos ligandos | 8. Ligandos radicais derivados de hidrocarbonetos |
| 3. Prefixos numéricos (di, tri, tetra, ...) | 9. Ligandos moleculares terminados em “a” |
| 4. Regra geral para sufixos | 10. Ligandos com nomes específicos |
| 5. Aniões terminados em “eto” | 11. Ligando que atua entre dois centros de coordenação |
| 6. Aniões terminados em “ido” | |

Complexos Aniônicos*

recebem a terminação “ato” seguido do seu número de oxidação em formato romano entre parenteses

* aniônico: portador de carga negativa

Multiplos ligandos

são nomeados na seguinte ordem:

neutros (moleculares), aniônicos (negativos), catiônicos (positivos).

ligantes de mesma natureza se ordena alfabeticamente.

Prefixos numéricos (di, tri, tetra, ...)

indica a quantidade de ligandos iguais.

variação dos prefixos numericos para: “dis, tris, tetrakis, pentakis, ...” em ligandos que possuem prefixos numéricos em seu nome (ex: ligandos orgânicos, dipiridina, trifosfina)

Exemplos:

- $[\text{CoF}_6]^{3-}$: Hexfluorocobaltato(III)
- $[\text{Ni}(\text{CO})_4]^+$: Tetracarbonilníquel(0)
- $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$: Diaminprata(I)
- $[\text{Mn}(\text{CO})_5]^+$: Pentacarbonilmanganato(-I)

Regra geral para sufixos

- “eto” \rightarrow “o”
- “ido” \rightarrow “o”
- “ito” \rightarrow “o”
- “ato” \rightarrow “ato”

Aniões terminados em “eto”

- Fluoreto (F^-) \rightarrow Fluoro
- Iodeto (I^-) \rightarrow Iodo
- Cloreto (Cl^-) \rightarrow Cloro
- Cianeto (CN^-) \rightarrow Ciano
- Brometo (Br^-) \rightarrow Bromo
- Amideto (NH_2^-) \rightarrow Amido

Com exceção do hidreto (H^-) que ou não sofre alteração ou se usa hidro

Aniões terminados em “ido”

- Hidróxido (OH^-) \rightarrow Hidroxo
- Peróxido (O_2^{-2}) \rightarrow Peroxo
- Óxido (O^{2-}) \rightarrow Oxo

Aniões terminados em “ato”

- Carbonato (CO_3^{2-}) \rightarrow Carbonato
- Sulfato (SO_4^{2-}) \rightarrow Sulfato
- Nitrato (NO_3^-) \rightarrow Nitrato
- Oxalato ($\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$) \rightarrow Oxalato
- Acetato (CH_3COO^-) \rightarrow Acetato
- Acetilacetonato ($\text{CH}_3\text{COCHCOCH}_3^-$) \rightarrow Acetilacetonato (ACAC)

Ligandos radicais derivados de hidrocarbonetos

matem o nome do radical

- Metil (CH_3) \rightarrow Metil (Me)
- Fenil (C_6H_5) \rightarrow Fenil (Ph ou \emptyset)
- Etil (C_2H_5) \rightarrow Etil (et)
- Ciclopentadienil (C_5H_5) \rightarrow Ciclopentadienil (Cp)

Ligandos moleculares terminados em “a”

o substituem por “o”

- Piridina ($\text{C}_5\text{H}_5\text{N}$) \rightarrow Piridino (Py)
- Dipiridina ($\text{C}_{10}\text{H}_5\text{N}$) \rightarrow Bipiridino (Bipy)
- Etilenodiamina ($\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2$) \rightarrow Etilenodiamino (En)
- Trifenilfosfina ($\text{P}(\text{C}_6\text{H}_5)_3$) \rightarrow Trifenilfosfino (PPh_3 ou $\text{P}\emptyset_3$)

Ligandos com nomes específicos

- Água (H_2O) \rightarrow Aquo
- Amónia (NH_3) \rightarrow Amino ou Amin

- Monóxido de carbono (CO) → Carbonilo
- Monóxido de azoto (NO) → Nitrosil
- Oxigénio (molecular) (O₂)* → Dioxigénio
- Azoto(molecular) (N₂)* → Diazoto
- Hidreto (H⁻) → Hidro ou Hidreto

* Nas formulas esses ligandos devem ser escritos entre parênteses

Ligando que atua entre dois centros de coordenação

complexos polinucleares quando o ligado atua entre os dois centros de coordenação, recebe a letra μ separada por hífen

Exemplo Complexos de coordenação:

- [CoF₆]³⁻: Hexfluorocobaltato(III)
- [Fe(SCN)₆]³⁻: Hexatiocianatoferrato(III)