



Teoria da Ligação Química

1º ANO

Horas de contacto: 22,5 T + 15 TP + 15 P + 5 OT

ECTS: 5

Programa

1. Primórdios da mecânica quântica.
2. Quantificação da energia e funções de onda. Mecânica quântica.
3. O átomo de hidrogénio e orbitais atómicas.
4. Átomos polieletrónicos: Energia das orbitais, carga nuclear efectiva, princípio de exclusão de Pauli, configuração electrónica, termos espectroscópicos e Regras de Hund.
5. Periodicidade das propriedades atómicas: raio atómico, energia de ionização e afinidade electrónica.
6. Teoria da ligação de valência: ligações sigma e pi, hibridização de orbitais atómicas, geometria molecular, conceito de ressonância, carga formal e número de oxidação.
7. Teoria das orbitais moleculares. Moléculas diatómicas. Ordem de ligação. Orbitais moleculares deslocalizadas.
8. Ligação química em sólidos cristalinos: Ligação iónica e teoria das bandas em metais.
9. Forças intermoleculares.
10. Trabalho no laboratório de química: segurança, operações elementares e apresentação dos resultados.

Bibliografia

- * A. Romão Dias, "Ligação Química" IST Press, 2006, ISBN: 9728469497
- * B. Mahan, R.J. Meyers, "Química, um curso universitário", tradução da 4ª Ed., Edgard Blucher L^{da}, 1993.
- * P.W. Atkins, "The Elements of Physical Chemistry", 4th Ed., Oxford, 2006.
- * R. Chang, "Química", 5ª Ed., McGraw-Hill, 1994.
- * A. R. West, "Basic Solid State Chemistry", 2nd Ed., Wiley, Chichester, 2001.
- * R. L. DeKock, H. B. Gray, "Chemical Structure and Bonding", University Science Books, Sausalito, California, 1989.