

## QG108 - Química Geral Teórica

### 1. Estrutura atômica: o átomo visto pela mecânica ondulatória:

- Função de onda
- Números quânticos e orbitais atômicos
- A forma dos orbitais atômicos

### 2. Configuração eletrônica do átomo e periodicidade

- Spin do elétron; magnetismo; paramagnetismo
- Princípio de Exclusão de Pauli
- Energia dos orbitais atômicos e preenchimento dos orbitais
- Configuração eletrônica do átomo (elementos do grupo principal e elementos de transição)
- Energia dos orbitais em íons e configuração eletrônica
- Propriedades atômica e tendências periódicas (tamanho do átomo e do íon, energia de ionização, afinidade eletrônica, eletronegatividade)
- Energia necessária para a formação de íons monoatômicos comuns e suas consequências químicas

### 3. Conceitos básicos de ligação química e estrutura molecular

- Elétrons de valência
- Formação da ligação química
- Ligação iônica
- Ligação covalente (pares ligantes, regra do octeto, estruturas de Lewis, estruturas de ressonância)
- Propriedades da ligação (ordem de ligação, comprimento e energia de ligação, polaridade da ligação, número de oxidação e carga formal do átomo)
- Forma molecular (correlação entre estrutura e pares de elétrons de valência: modelo VSEPR)
- Polaridade molecular

### 4. Teoria da ligação de valência

- Orbitais híbridos e estruturas de ressonância

### 5. Teoria do orbital molecular

- Princípios da teoria do orbital molecular
- Orbitais moleculares para moléculas diatômica homonucleares
- Orbitais moleculares para moléculas diatômica heteronucleares

### 6. Ligação iônica

- Propriedades das substâncias iônicas
- Ocorrência da ligação iônica
- Estrutura das redes cristalinas
- Energia de rede
- Ciclo de Born-Haber
- Efeitos do tamanho: raio iônico, eficiência do empacotamento e redes cristalinas
- O caráter covalente em ligações predominantemente iônicas

### 7. Metais de transição

- Introdução à teoria do campo cristalino (desdobramento dos orbitais *d*)

### Referências Bibliográficas:

1. P. F. dos Santos F<sup>o</sup>, Estrutura Atômica & Ligação Química, Um texto para o curso de QG-108, 1998.
2. B. M. Mahan e R. J. Myers, Química, Um curso universitário, Tradução da 4<sup>a</sup> Edição Americana, 2003.
3. P. Atkins e L. Jones, Princípios de Química - Questionando a vida moderna e o meio-ambiente, Bookman, 2001.