

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Componente Curricular: LIGAÇÃO QUÍMICA – UMA VISÃO QUÂNTICA (OPTATIVA)

Carga Horária: 60 horas.

Numero de Créditos: 04

Pré-Requisitos: QUÍMICA QUÂNTICA E ESPECTROSCOPIA

Público-alvo: Bacharelado em Química.

OBJETIVOS: Mostrar como a química quântica pode ser utilizada no entendimento da ligação química. Confrontar o formalismo da teoria do orbital molecular com o da teoria de valência, juntamente com suas vantagens e desvantagens. Mostrar que a força de uma ligação está relacionada à superposição dos orbitais que a formam. Mostrar a necessidade da hibridização como forma de aumentar a capacidade de ligação de um dado orbital. Entender como o diagrama de correlação dos orbitais pode ser utilizado para explicar importantes conceitos relacionados à estabilidade da ligação química. Mostrar como os orbitais moleculares são utilizados na construção da função de onda molecular. Mostrar como a ligação iônica resulta de um caso limite da ligação covalente, no qual há uma grande diferença entre as eletronegatividades dos átomos envolvidos. Mostrar como a teoria de bandas em metais e sólidos covalentes resulta da aplicação da teoria dos orbitais moleculares.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Ser capaz de explicar as diferenças entre a teoria da ligação de valência e a teoria do orbital molecular. Ser capaz de mostrar a equivalência entre estes formalismos, nos seus respectivos limites. Ser capaz de correlacionar propriedades moleculares como geometria e força de ligação de moléculas simples com os seus respectivos diagramas de orbitais moleculares. Ser capaz de construir funções de ondas moleculares, para casos relativamente simples, a partir dos orbitais moleculares. Ser capaz de explicar o tratamento simplificado dado às ligações iônicas, como um caso limite da total falta de covalência. Ser capaz de correlacionar as estruturas de bandas com as propriedades elétricas e térmicas de metais, semicondutores e isolantes.

EMENTA / PROGRAMA

Mecânica Quântica: A função de onda, Equação de Schrodinger, Aproximação de Born-Oppenheimer; Tratamento exato e variacional para o íon molecular H_2^+ ; A teoria de Heitler-London e da ligação de valência como forma de tratar a ligação covalente; Teoria dos orbitais moleculares e a sua utilização na construção da função de onda molecular; Ligações iônicas e Ligações metálicas; Sólidos covalentes.

METODOLOGIA

Aulas expositivas.

AVALIAÇÃO :

Provas escritas e seminários.

BIBLIOGRAFIA

1. DEKOCK, R. L.; Gray, H. B., *Chemical Structure and Bonding*, University Science Books, 1989.
2. PAULING, L.; Wilson, Jr., E. B., *Introduction to Quantum Mechanics (with application to chemistry)*, Dover, 1963.
3. PAULING, L., *The Nature of Chemical Bond: Structural Properties.*, 3rd ed., Cornell University Press, Itahaca, NY, 1960.