



EMENTA DE DISCIPLINA / ATIVIDADE OBRIGATÓRIA

UNIDADE ACADÊMICA Instituto de Química	DEPARTAMENTO Departamento de Química Geral e Inorgânica		
NOME DA DISCIPLINA Aspectos e Fundamentos das Ligações Químicas (QUI01-9242)	() OBRIGATÓRIA (X) ELETIVA	C. HORÁRIA 45	CRÉDITOS 3
NOME DO PROJETO / CURSO Programa de Pós-graduação em Química/Mestrado e Doutorado ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: Química	DISTRIBUIÇÃO DE CARGA HORÁRIA		
	TIPO DE AULA	C. HORÁRIA	Nº CRÉDITOS
	TEÓRICA	45	3
	PRÁTICA	-	-
	TOTAL	45	3
PRÉ-REQUISITOS Química Avançada	(X) Disciplina do curso de mestrado acadêmico (X) Disciplina do curso de Doutorado		

EMENTA

Equação de Schrödinger; Orbitais Atômicos; considerações de simetria molecular; Teoria do Orbital Molecular aplicada - moléculas Diatômica (homo e heteronucleares), triatômicas e com Quatro ou Mais Átomos; Orbitais Moleculares envolvendo orbitais de valência d ; Orbitais de fronteira. Teoria de Ligação de Valência – Estruturas de Lewis, carga formal, RPECV, ressonância e hibridização; Interações intermoleculares; Origem e aspectos das Ligações de Hidrogênio; Fragmentação de energia de ligações intra e intermoleculares (EDA); Ligação Iônica e Ligação metálica.

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

BALLHAUSEN, C. J., GRAY, H. B. *Molecular electronic structures: an introduction*. 1ª edição. Reading, MA: Benjamin/Cummings Publishing Company, 1980.
GRAY, H. B. *Electrons and Chemical Bonding*. 1ª edição. New York: W. A. Benjamin, Inc., 1965.
OLIVEIRA, G. M. de. *Simetria de Moléculas e Cristais: Fundamentos da Espectroscopia Vibracional*. 1ª edição. Porto Alegre: Bookman, 2009.
CLUGSTON, M., FLEMMING, R. *Advanced Chemistry*. Oxford University Press, 2008.
HUHEEY, J. E.; Keiter, E. A. Keiter; Keiter, R. L., *Inorganic chemistry: Principles of structure and reactivity*. 4ª edição. New York: Harper Collins, 1993.
MIESSLER, G. L.; TARR, D. A., *Inorganic Chemistry*, 4ª edição. Prentice Hall, 2011.
UMEYAMA, H. AND MOROKUMA, K. *The origin of hydrogen bonding. An energy decomposition study*. *J. Am. Chem. Soc.*, 99 (5), p. 1316–1332, 1977.
SCHULTZ, E. J. *The Nature of Hydrogen Bonding*. *Chem. Educ.*, 82 (3), p. 400A, 2005.
MC QUARRIE, D. A.; SIMON, J. T. *Physical chemistry: a molecular approach*. Sausalito: University Science Books, 1997.

COORDENADOR DO PROJETO / CURSO

ASSINATURA

