

Código: <b>QG108</b>								
Nome: <b>Química Geral Teórica</b>								
Nome em Inglês: <b>General Theoretical Chemistry</b>								
Nome em Espanhol: <b>Química General Teórica</b>								
Tipo de Disciplina: <b>Semanal</b>								
Tipo de Aprovação: <b>Nota e Frequência</b>								
Característica: <b>Regular</b>								
Frequência: <b>75%</b>								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: <b>Semestral / Todos os períodos</b>								
Exige Exame: <b>Sim</b>								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
<b>4</b>	-	-	-	-	-	<b>4</b>	<b>15</b>	<b>4</b>
Ocorrência nos Currículos: <b>05, 50, 56, 63</b>								
Pré-requisitos:								
Ementa: <b>Estrutura atômica; periodicidade das propriedades atômicas; modelos de ligação química (iônica e covalente); geometria molecular; interações intermoleculares, propriedades gerais de sólidos, líquidos e gases. Noções de termodinâmica.</b>								
Programa:								
1. Estrutura atômica								
Modelos atômicos. Funções de onda e níveis de energia. Números quânticos e orbitais atômicos. Spin do elétron; Energia dos orbitais. Magnetismo e Paramagnetismo. Regra de Hund e princípio de exclusão de Pauli. Preenchimento dos orbitais e configuração eletrônica dos átomos.								
2. Periodicidade das propriedades atômicas								
Configuração eletrônica e a tabela periódica. Carga nuclear efetiva. Periodicidade das propriedades atômicas: raio atômico, raio iônico, energia de ionização, afinidade eletrônica e suas anomalias. Principais grupos dos elementos.								
3. Modelos de ligação química (iônica e covalente) e geometria molecular								
Introdução geral aos conceitos de ligação química: Ligação iônica e covalente.								
Ligação iônica. Configuração eletrônica de íons, energia de ionização e afinidade eletrônica. Ciclo de Born-Haber. Estrutura e energia de retículo cristalino. Caráter covalente em ligações predominantemente iônicas (distância de ligação, solubilidade, estabilidade térmica, ponto de fusão e sublimação)								
Ligação Covalente. Estruturas de Lewis. Geometria molecular: modelo VSEPR. Teoria da ligação de valência e modelo da hibridização de orbitais. Orbitais híbridos envolvendo orbitais-d. Ligações múltiplas. Limitações da teoria da ligação de valência.								
Propriedades da ligação química: entalpia e comprimento de ligação. Ordem da ligação. Estruturas de ressonância. Polaridade das ligações químicas. eletronegatividade.								
Orbitais moleculares para moléculas diatômicas homonucleares e heteronucleares.								

#### 4. Interações intermoleculares

Interações íon-íon; íon-dipolo; dipolo-dipolo e dipolos induzidos. Ligação de hidrogênio. Efeitos destas interações em pontos de fusão, de ebulição e solubilidade. Estrutura geral de líquidos. Gás ideal e gases reais.

#### 5. Noções de termodinâmica e equilíbrio químico

As Leis da Termodinâmica; critérios de espontaneidade; energia de Gibbs. Constantes de equilíbrio; resposta do equilíbrio a mudanças das condições.

#### 6. Cinética química

Ordem de reação. Reações de primeira e segunda ordem. Tempo de meia vida. Influência da temperatura na velocidade de reação; energia de ativação

#### **Bibliografia Básica**

- 1) ATKINS, P.W.; JONES, L. **Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente**, Obs: O Sistema de Bibliotecas da Unicamp dispõe de e-books e diversos exemplares das edições de 2001; 2006 (3. Ed), 2012 (5. Ed), 2018 (7.ed.).
- 2) KOTZ, J. C. TREICHEL JR, P. **Química e reações químicas**, 3ª edição, Volumes 1 e 2. RJ: Livros Técnicos e Científicos, 1998. (e 4ª edição, Volumes 1 e 2. RJ: Livros Técnicos e Científicos, 2002).
- 3) BROWN, T.L.; LEMAY JR., H.E.; BURSTEN, B.E.; BURGE, J.R. **Química - a ciência central**. 9ª. edição. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2005

#### **Bibliografia Complementar**

- 1) CHANG, R. **Química geral: conceitos essenciais**, 4a edição, Porto Alegre, RS AMGH, 2010 (livro impresso e e-book)
- 2) RUSSEL, J. B. **Química geral**, 2ª edição, Volumes 1 e 2. São Paulo: Makron Books, 1994
- 3) FILHO, P.F.S. **Estrutura atômica e ligação química** Campinas: Unicamp, 2000.
- 4) LEE, J. D. **Química Inorgânica não tão concisa**. 5ª ed., São Paulo: Edgard Blücher, 1999.
- 5) BRADY, J.E. **Química Geral**. 2ª ed., Volumes 1 e 2. Rio de Janeiro: LTC, 1986.