

---

**Ano Letivo** 2019-20

---

**Unidade Curricular** TEORIA DA LIGAÇÃO QUÍMICA

---

**Cursos** CIÊNCIAS FARMACÊUTICAS (Mestrado Integrado)  
BIOQUÍMICA (1.º ciclo)

---

**Unidade Orgânica** Faculdade de Ciências e Tecnologia

---

**Código da Unidade Curricular** 140064296

---

**Área Científica** QUÍMICA

---

**Sigla**

---

**Línguas de Aprendizagem** Português

---

**Modalidade de ensino** Presencial

---

**Docente Responsável** João Paulo Gil Lourenço

DOCENTE	TIPO DE AULA	TURMAS	TOTAL HORAS DE CONTACTO (*)
João Paulo Gil Lourenço	PL; T; TP	TI; TP2; TP3; PL3	28T; 42TP; 21PL
Carolina Maria Apolinário do Rio	PL	PL4; PL5	42PL
André Duarte Lopes	PL; TP	TP1; PL1; PL2A; PL2B	21TP; 42PL

\* Para turmas lecionadas conjuntamente, apenas é contabilizada a carga horária de uma delas.

ANO	PERÍODO DE FUNCIONAMENTO*	HORAS DE CONTACTO	HORAS TOTAIS DE TRABALHO	ECTS
1º	S1	28T; 21TP; 21PL	168	6

\* A-Anual;S-Semestral;Q-Quadrimestral;T-Trimestral

### Precedências

Sem precedências

### Conhecimentos Prévios recomendados

Conhecimentos básicos de química ao nível do 12º ano do ensino secundário.

### Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências)

O aluno deverá ser capaz de prever as propriedades de um átomo, avaliar as implicações destas propriedades na ligação química e utilizar diferentes abordagens para descrever os diversos tipos de ligação química. Deve ainda ser capaz de estimar a geometria de uma molécula e compreender as implicações das forças intermoleculares na propriedades e estados físicos da matéria. Deverá, também, saber trabalhar num laboratório de Química e elaborar um relatório.

### Conteúdos programáticos

1. Primórdios da mecânica quântica.
2. Quantificação da energia e funções de onda.
3. O átomo de hidrogénio e orbitais atómicas.
4. Átomos polieletrónicos.
5. Periodicidade das propriedades atómicas.
6. Teoria da ligação de valência.
7. Teoria das orbitais moleculares.
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 (a desenvolver na componente laboratorial).

---

### **Demonstração da coerência dos conteúdos programáticos com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular**

A química é uma ciência fundamental e tem um papel muito importante em todos os aspectos da vida do dia a dia, em biologia ou em processos industriais. A ligação química define as propriedades e reactividade das moléculas e tem um papel-chave em todos os processos biológicos e químicos. Esta UC começa com o ensino das ferramentas necessárias ao estabelecimento da estrutura atómica e com a importância desta estrutura na ligação química das moléculas. A geometria e a ligação química são estudadas com um nível introdutório teórico recorrendo às principais teorias: teoria do enlace de valência e orbitais moleculares. São usadas abordagens diferentes para a descrição da ligação química nos sólidos iónicos e metais. Apesar de se situarem na fronteira da ligação química, as forças intermoleculares têm um papel-chave na definição dos estados físicos da matéria. As aulas laboratoriais permitem desenvolver as competências em laboratório de química e apresentação de resultados.

---

### **Metodologias de ensino (avaliação incluída)**

As aulas teóricas são expositivas, incluindo exemplos ilustrativos de aplicação dos conceitos. Os alunos são incentivados a participar activamente nestas aulas, colocando questões e discutindo os temas abordados.

Nas aulas teórico-práticas são resolvidos exercícios que ilustram os conceitos abordados nas aulas teóricas. Os alunos são encorajados a resolverem por si próprios os exercícios.

No início das aulas laboratoriais, as dúvidas sobre o enquadramento teórico e o procedimento experimental são esclarecidas. No final da aula, os alunos redigem um relatório do trabalho efectuado. A avaliação desta componente (20 % da classificação final da disciplina) inclui o relatório, o desempenho laboratorial e a preparação prévia.

A componente teórica é avaliada por exame ou por duas frequências a realizar durante o semestre (80% da classificação final). Para obter aprovação, os alunos terão que obter pelo menos 9,5 valores a cada uma das componentes.

---

### **Demonstração da coerência das metodologias de ensino com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular**

Os conceitos teóricos são transmitidos de forma expositiva, havendo no entanto o especial cuidado de adequar o nível de teoria ao exigido pelos diversos conceitos mas tendo também em atenção os conhecimentos prévios dos alunos. Incentivando os alunos a colocarem dúvidas bem como solicitando respostas a diversas questões torna-se possível a avaliação dos conhecimentos já adquiridos, ajustando assim o ritmo das aulas.

Os exercícios apresentados na ficha de problemas para resolução pelos estudantes permitem dar ênfase aos conhecimentos que se pretende que os estudantes adquiram, direccionando a sua aprendizagem para os objectivos da UC. Estes exercícios cobrem todos os temas da UC.

Nas aulas laboratoriais são transmitidos conhecimentos em várias técnicas básicas a serem usadas em disciplinas posteriores, com especial ênfase na preparação de soluções. A segurança durante o trabalho laboratorial é sempre um dos temas importantes em cada uma das aulas. Conhecimentos sobre apresentação de resultados, incluindo estimativas de erros, contribuem para uma elaboração correcta de um relatório do trabalho efectuado. Adicionalmente, dois dos trabalhos a efectuar estão directamente relacionados com a matéria leccionada nas aulas teóricas (modelos moleculares e software de modelação molecular), tentando que os alunos ganhem percepção sobre geometria molecular e interações entre átomos e entre moléculas.

---

### **Bibliografia principal**

- A. Romão Dias, Ligação Química, 3ª Ed., IST Press, Lisboa, 2016 .  
P. Atkins, J. De Paula Elements of Physical Chemistry, 4th Ed., Oxford University Press, Oxford, 2006.  
R. Chang, Química, 8ª Ed., McGraw-Hill, 2005.

**Academic Year** 2019-20

**Course unit** CHEMICAL BONDING THEORY

**Courses** PHARMACEUTICAL SCIENCES (Integrated Master's)  
BIOCHEMISTRY (1st Cycle)

**Faculty / School** FACULTY OF SCIENCES AND TECHNOLOGY

**Main Scientific Area** QUÍMICA

**Acronym**

**Language of instruction** Portuguese

**Teaching/Learning modality** Presential

**Coordinating teacher** João Paulo Gil Lourenço

Teaching staff	Type	Classes	Hours (*)
João Paulo Gil Lourenço	PL; T; TP	TI; TP2; TP3; PL3	28T; 42TP; 21PL
Carolina Maria Apolinário do Rio	PL	PL4; PL5	42PL
André Duarte Lopes	PL; TP	TP1; PL1; PL2A; PL2B	21TP; 42PL

\* For classes taught jointly, it is only accounted the workload of one.

#### Contact hours

T	TP	PL	TC	S	E	OT	O	Total
28	21	21	0	0	0	0	0	168

T - Theoretical; TP - Theoretical and practical ; PL - Practical and laboratorial; TC - Field Work; S - Seminar; E - Training; OT - Tutorial; O - Other

#### Pre-requisites

no pre-requisites

#### Prior knowledge and skills

Knowledge of basic chemistry concepts at the level of 12th grade

#### The students intended learning outcomes (knowledge, skills and competences)

At the end of the course, students should be able to predict the properties of an atom, understand the implications of those properties on chemical bonding and use different approaches to describe the different types of chemical bonding. Additionally, students should also be able to estimate the geometry of a molecule and understand the implications of molecular forces on properties and physical states of matter. Skills in chemistry laboratory work and writing a report are also expected to be developed.

#### Syllabus

- ?Early evidence for quantum theory.
- ?Quantization of energy and wave functions. Quantum mechanics.
- ?Hydrogen atom and atomic orbitals.
- ?Many-electron atoms.
- ?Periodic trends in atomic properties: atomic radius, ionization energy and electron affinity.
- ?Valence bond theory.
- ?Molecular orbital theory.
- ?Chemical bonding in solids: ionic model and the band theory.
- ?Intermolecular forces.
- ?Chemistry laboratory: security, basic techniques and reporting of results (to be developed in the laboratory courses).

### **Demonstration of the syllabus coherence with the curricular unit's learning objectives**

Chemistry is a fundamental science and it plays a very important role in all aspects of day-to-day life, in biology and in industrial processes. The chemical bonding defines the properties and reactivity of molecules and plays a key role in all the biological and chemical processes. This CU starts with the tools to achieve atomic structure and the importance of this structure to understand chemical bonding in the molecules. The geometry and chemical bonding in simple molecules is studied with an introductory theoretical level using the major theories: valence bond and molecular orbitals. Different approaches are used to describe the bonding in ionic solids and metals. Although in the borderline of chemical bonding, intermolecular forces are of primary importance to the physical states of matter. The laboratory courses will develop the skills in the laboratory work and reporting results.

---

### **Teaching methodologies (including evaluation)**

Theoretical lectures include examples of application of concepts. Students are encouraged to participate actively in these lectures, discussing the themes that are being studied.

Sets of exercises, that cover the topics of the theoretical lectures, are primary solved by the students with the adequate guidance of the professor.

Laboratory protocols are previously given to the students in order to allow a correct preparation of the laboratory classes. At the end of each class the students write a report that, along with the previous preparation and the laboratorial performance, will be used for the assessment of laboratorial component (that has a weight of 20% in the final grade).

Theoretical component is evaluated by a final exam (or by the mean of the marks obtained in two written tests along the semester) that has a weight of 80 % in the final grade.

A classification of at least 9.5 in each component is required.

---

### **Demonstration of the coherence between the teaching methodologies and the learning outcomes**

Theoretical concepts are transmitted in an expository way, however, with special care to adequate the theory level to that needed by the different concepts but taking also into consideration the background of the students. Encouraging the students to express their difficulties and requesting answers to various questions, it is possible to evaluate the learning progress and do a fine-tuning of the concept progression.

Students are provided with a set of exercises that cover all the topics studied in the theoretical lectures and allow emphasizing the knowledge that should be acquired by the students directing the learning process to the objectives of the CU.

The laboratorial work includes knowledge of several basic techniques to be used in other disciplines, with special focus on preparation of solutions. Security in laboratorial environment is always a theme in each class. Knowledge about reporting data, including uncertainty analysis, is an important contribution to a well-written report. Additionally, two of the laboratorial classes are dedicated to explore the concepts conveyed in theoretical lectures (molecular models and use of software of molecular modelling) highlighting molecular geometry issues and interactions between atoms and between molecules.

---

### **Main Bibliography**

A. Romão Dias, ?Ligação Química?, IST Press, Lisboa, 2007.?

P.W. Atkins, J. De Paula ?Elements of Physical Chemistry?, 6th Ed., Oxford, 2013.?

R. Chang, ?Química?, 8ª Ed., McGraw-Hill, 2005.