



2º Semestre - 2020

Disciplina	
Código	Nome
QF535	Introdução à Química Quântica

Turmas	Horário	Local
A	Segunda-feira 21h às 23h	Condução Remota
A	Quarta-feira 19h às 21h	Condução Remota

Docentes
Rogério Custodio, rogerct@unicamp.br , sala H-318

Disciplinas Teóricas – Plano de Ação IQ 2S/2020
As disciplinas teóricas do 2S/2020, em virtude da pandemia de COVID-19 e da necessidade de manutenção de distanciamento social, serão conduzidas integralmente de forma remota e mediada por tecnologia, incluindo os processos avaliativos.

Forma de Condução das Aulas Remotas Mediadas por Tecnologia
<input checked="" type="checkbox"/> Aulas online síncronas (ao vivo) <input type="checkbox"/> Aulas Gravadas <input type="checkbox"/> Aulas online ao vivo + disponibilização da gravação da aula
Descrição:

Forma de Atendimento às Dúvidas das Aulas Remotas
Descrição: Disponibilidade de atendimento em qualquer horário por e-mail.

Plataforma Virtual que se pretende utilizar
<input checked="" type="checkbox"/> Google Classroom + Google Meet <input type="checkbox"/> Moodle
Outra (especificar):

Forma de Condução das Avaliações e Prazos de Entrega
Descrição: A prova será sobre o conteúdo de toda a matéria e terá um prazo de 12h para ser realizada se iniciando no horário da aula. A apresentação dos seminários será indicada na aula imediatamente anterior. Os temas dos seminários serão disponibilizados com pelo menos uma semana de antecedência. O resumo do seminário deverá ser entregue apenas pelo grupo que apresentou o seminário no dia da apresentação.

Critérios de Avaliação e Aprovação

Descrição:

- 1) Será realizada uma (1) prova no final do semestre letivo.
- 2) Todos os alunos apresentarão seminários individuais ou em grupo, dependendo do número de alunos matriculados. Os seminários receberão nota que comporão a média da disciplina. Nos seminários deverão ser explorados aspectos históricos, didáticos e conceituais contextualizando ao tema a ser apresentado.
- 3) Súmulas dos temas a serem apresentados nos seminários devem ser disponibilizados até o dia do seminário. Este conteúdo será acessado por todos os alunos da turma e disponibilizado pelo docente responsável.

A média M será determinada por: $M = 0,4 * P1 + 0,4 * S1 + 0,2 * R1$, sendo P1 a nota da prova, S1 a nota do seminário e R1 a nota do resumo.

Média maior ou igual a cinco (5) o aluno está aprovado. Média menor do que cinco (5) o aluno fará exame. A média final (MF), em caso de exame, será a média simples entre a média atingida durante o semestre e a nota do exame (Ex), ou seja: $MF = (M + Ex) / 2$. Média final maior ou igual a cinco (5) o aluno está aprovado.

Calendário – Disciplinas Teórica

(incluir a data de todas as atividades avaliativas, inclusive exame)

A prova será ministrada no dia 18 de janeiro de 2021.

O exame será agendado para o dia 25 de janeiro de 2021.

A partir do dia 30/09 serão realizados seminários na primeira hora de aula por alunos matriculados nas disciplinas. As datas dos seminários serão: 30/09, 05/10, 14/10, 26/10, 04/11, 09/11, 30/11, 09/12, 16/12, 23/12, 06/01/2021 e 13/01/2021. Os alunos escalados para os seminários serão definidos com pelo menos uma semana de antecedência e o número de alunos para cada tema será dependente do número de matriculados. Cada grupo de seminaristas deverá apresentar um resumo de uma (01) página com as principais informações sobre o tópico do seminário. Alunos que tiverem impossibilidade de apresentação do seminário deverão substituir a apresentação por um texto completo sobre os aspectos que seria discutidos em sua apresentação.

12/10 – Não haverá atividades

21 a 23/10 – Congresso de Iniciação Científica (no período em que estiver sendo realizado o congresso os alunos que participarem do evento estarão dispensados das aulas.)

28/10 – Não haverá atividades

02/11 – Não haverá atividades

23 a 27/11 – Semana da Química Virtual – Não haverá aula, sendo considerado dia letivo.

25/11 – Reunião de Avaliação de Curso

07 e 08/12 – Não haverá atividades

24 a 31/12 – Não haverá atividades (recesso).

19/01 – Término das Aulas do 2S/2020

20 a 26/01 – Semana de Exames Finais do 2S/2020

Outras informações relevantes

O conteúdo da disciplina será dividido em cinco partes de acordo com o programa da disciplina (<https://www.igmm.unicamp.br/sites/default/files/QF535%20-%20Introdução%20à%20Química%20Quântica%20%28alterações%20cat.%202019%29.pdf>). Todo material apresentado (slides, resumos dos seminários, programa da disciplina e outros dados) será disponibilizado em site desenvolvido pelo docente à medida que o conteúdo for ministrado.

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA



Disciplina	
Código	Nome
QF535	Introdução à Química Quântica

Vetor
OF:5-2 T:004 P:000 L:000 O:002 D:000 HS:006 SL:004 C:006 AV:N EX:5 FM:75%

Pré-Req	F 328
---------	-------

Ementa
Evolução histórica da descrição da luz e da matéria. A antiga mecânica quântica, quantização da energia da radiação e mecânica. Os postulados da mecânica quântica ondulatória. Aplicações a sistemas simples. Química quântica: estruturas atômicas e estruturas moleculares de sistemas simples. Ensino de química quântica: atividades orientadas.

Programa
I. Aspectos históricos da física, descrição da luz e da estrutura da matéria anteriores à antiga física quântica. A evolução da teoria é conduzida pela evolução experimental. Alguns experimentos que as teorias não puderam modelar.
II. As fundações da antiga mecânica quântica, Planck, Einstein: a nova descrição da radiação eletromagnética; Bohr: a quantização da energia mecânica, estados estacionários, transições radiativas, um modelo quântico para o átomo de H Falhas, fraquezas e tentativas de correção do modelo de Bohr.
III. As fundações da moderna química quântica, De Broglie: dualidade, ondas de matéria e os experimentos que as detectaram; Heisenberg e a mecânica matricial; A mecânica ondulatória de Schroedinger; A existência do spin do elétron e sua ausência na teoria de Schroedinger; Dirac: a linearização da equação de onda, previsão e descoberta das antipartículas;
IV. Os postulados da mecânica quântica não relativística, Aplicações a sistemas simples uni e bidimensionais; O átomo de H segundo Schroedinger; Átomos multieletrônicos; Princípio de Exclusão de Pauli e suas consequências; Os primeiros trinta anos da mecânica quântica, uma visão integrada
V. Química Quântica – Os limites práticos da teoria e métodos para contorna-los; Hartree e a aproximação das partículas independentes; Fock: férmions e os átomos multieletrônicos; Correlação eletrônica; A molécula H_2^+ e a natureza da ligação química; Moléculas diatômicas e poliatômicas: o método CLAO; A química quântica ensinada no colégio: Estruturas de Lewis e seu contexto histórico. Pauling, hibridização e diagrama de ocupação orbital. Teoria da ligação de valência.

VI. **Atividades Orientadas: O ensino da química quântica no colégio.**

Bibliografia

1. D.A.McQuarrie and J.D.Simon, Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books; 1a. Edição (1997).
2. Sebera, D.K., Estrutura Eletrônica e Ligação Química, Ed. Polígono, 1a Edição(1968)
3. Giberti, A., Origens históricas da física moderna, Fundação Calouste Goulbekian, 1a Edição (1982)
4. Gamow, G., Thirty Years that Shook Physics: The Story of Quantum Theory, Dover, Reprint, (1985)
5. Hoffman, B.,The Strange Story of the Quantum, Dover, Reprint, (1985),

CrITÉRIOS de Avaliação

CrITÉRIOS de avaliação definidos pelo Professor, com base no disposto na Seção I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliação do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduação. Frequência: 75 % (* O abono de faltas será considerado dentro do previsto no capítulo VI, seção X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduação)