



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre - 2019

Disciplina	
Código	Nome
QF535	Introdução à Química Quântica

Turmas	Horário	Local
A	Segunda-feira 21h às 23h	IQ01
A	Quarta-feira 19h às 21h	IQ02

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

Critérios de Avaliação e Aprovação
<ol style="list-style-type: none">1) Será realizada uma (1) prova no final da disciplina.2) Todos os alunos apresentarão seminários individuais ou em grupo, dependendo do número de alunos matriculados. Os seminários receberão uma nota que comporão a média da disciplina. No seminário deverão ser explorados aspectos históricos, didáticos e conceituais contextualizando o tema a ser apresentado.3) Sumulas dos temas a serem apresentados nos seminários devem ser disponibilizados em site a ser acessado pelos alunos e disponibilizado pelo docente responsável. <p>A média M será determinada por: $M = 0,4 \cdot P1 + 0,4 \cdot S1 + 0,2 \cdot R1$, sendo P1 a nota da prova, S1 a nota do seminário e R1 a nota do resumo.</p> <p>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), neste caso, 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.</p> <p>Será dada prova substitutiva nos casos previstos no regimento. Esta prova será ministrada no final do semestre e conterà toda a matéria.</p> <p>Casos não previstos no regimento, poderão ser avaliados e eventualmente a nota do próprio exame poderá ser considerada como nota de prova substitutiva.</p>

Calendário
<p>A prova será ministrada no dia 27 de novembro.</p> <p>O exame será agendado para o dia 09 de dezembro.</p> <p>A partir do dia 19/08 serão realizados seminários na primeira hora de aula todas as segundas-feiras por alunos matriculados nas disciplinas. As datas dos seminários serão: 19/08, 26/08, 02/09, 09/09, 16/09, 30/09, 07/10, 14/10, 21/10, 04/11, 11/11, 18/11 e 25/11. Os alunos escalados para os seminários serão definidos na aula anterior e o número de alunos para cada tema será dependente do número de matriculados.</p>

Outras informações relevantes

O conteúdo da disciplina será dividido em cinco partes de acordo com o programa da disciplina (<https://www.iqm.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. O site será disponibilizado no link: <http://ishtar.iqm.unicamp.br/qf535/>.

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA

PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS



Disciplina	
Código	Nome
QF535	Introdução à Química Quântica

Vetor
OF:S-2 T:004 P:000 L:000 O:002 D:000 HS:006 SL:004 C:006 AV:N EX:S 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 contorná-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)