



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre 2024

Disciplina	
Código	Nome
QF535	Introdução à Química Quântica

Turmas	Horário	Local
A	Terça-feira 21h às 23h	CB16
A	Quarta-feira 19h às 21h	CB16

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

Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações
Descrição: A disciplina será ministrada com aulas pelo docente com parte do histórico do desenvolvimento das ideias que levaram a formulação da teoria quântica. A abordagem deve privilegiar aspectos que possam ser compreendidos em nível secundário/colegial. Temas específicos que complementem o desenvolvimento das aulas serão atribuídos aos alunos na forma de seminários em grupo. Os seminários devem sempre contextualizar o desenvolvimento das ideias e explorar o ambiente histórico em que foram desenvolvidos. A organização dos grupos fica a critério dos próprios alunos. O docente deve indicar apenas o número máximo de alunos por grupo. Os alunos apresentarão os temas em aula e serão questionados sobre eles, quando se dará uma discussão mais ampla sobre cada tópico. Juntamente com a apresentação, deverá ser entregue um resumo de uma página com os aspectos principais abordados nos seminários. O resumo do seminário deverá ser entregue apenas pelo grupo que apresentou o seminário. Ao final do semestre será realizada uma única prova sobre todo o conteúdo da disciplina.

Prazos de Entrega das Atividades e dos Resultados das Avaliações
Descrição: Os seminários dos grupos de alunos serão montados na primeira semana de aula. O resumo do seminário poderá ser entregue até uma semana após a apresentação. A apresentação dos seminários deve ter duração mínima de 1h. As datas da apresentação dos seminários serão estabelecidas, mas poderão sofrer algum adiamento dependendo do desenvolvimento das aulas apresentadas pelo professor.

Critérios de Avaliação e Aprovação
Descrição detalhada do método para o cálculo da média parcial e da nota final (que combine a média parcial e nota do exame)
<ol style="list-style-type: none">1) Será realizada uma (1) prova no final do semestre letivo.2) Todos os alunos apresentarão seminários 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 o tema a ser apresentado.3) A nota do seminário é para o grupo e não para os alunos individualmente.4) Os resumos dos temas apresentados nos seminários devem ser disponibilizados até uma semana após a apresentação. Este conteúdo será acessado por todos os alunos da turma e disponibilizado pelo docente.

A média M será determinada por: $M = 0,5 * P1 + 0,4 * S1 + 0,1 * R1$, sendo P1 a nota da prova, S1 a nota ou média simples do(s) seminário(s) e R1 a nota ou média simples do(s) resumo(s). 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. Considerando que os seminários são ministrados por grupos de alunos, a nota de cada seminário será atribuída ao grupo. Não será imposta uma média parcial mínima para a realização de exame. Todos os alunos terão direito de realizar o exame, caso não tenham atingido nota suficiente para aprovação. Os alunos devem apresentar uma frequência mínima de 75% nas aulas, como parte do critério de aprovação, satisfazendo o artigo 56 do Regimento Geral da Graduação. O exame será utilizado como prova substitutiva em caso de necessidade de acordo com a **Deliberação CG 2022/01** sobre **PROVA SUBSTITUTIVA EM CASO DE FALTA JUSTIFICADA POR COVID-19**.

Forma de Atendimento Extra-Classe

Descrição: Disponibilidade de atendimento em qualquer horário por e-mail ou agendamento de horário para esclarecimentos presencialmente ou online através do Google Classroom. Não há restrição de horário de atendimento, exceto em caso em que houver sobreposição de horário com outras atividades de caráter institucional do docente. Em resumo, possibilidade de atendimento em quase qualquer horário ou dia da semana.

Calendário	
Data	Atividade
06/08/2024	Início das aulas da disciplina e apresentação da disciplina
07/08/2024	aula
13/08/2024	aula
14/08/2024	aula
27/08/2024	aula
28/08/2024	aula
03/09/2024	aula
04/09/2024	aula
10/09/2024	Seminário + discussão
11/09/2024	Seminário + discussão
17/09/2024	Seminário + discussão
18/09/2024	Seminário + discussão
24/09/2024	Seminário + discussão
25/09/2024	Seminário + discussão
01/10/2024	aula
02/10/2024	aula
08/10/2024	aula
09/10/2024	aula
16/10/2024	aula
22/10/2024	aula
23/10/2024	aula
29/10/2024	Seminário + discussão
30/10/2024	Seminário + discussão
05/11/2024	Seminário + discussão
06/11/2024	Seminário + discussão
12/11/2024	Seminário + discussão

13/11/2024	Seminário + discussão
19/11/2024	aula
26/11/2024	Prova
10/12/2024	Exame
Art. 58 do Regimento Geral de Graduação: O Exame deverá ser realizado no período previsto pelo Calendário Escolar e deverá estar agendado para o mesmo dia da semana e horário em que são ministradas as aulas da disciplina, exceto na ocorrência de feriado ou ponto facultativo.	
19 a 23/08 - Semana da Química - não haverá aula para as disciplinas dos cursos 05/50. 07/09 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 12/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 15/10 - Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula 28/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 02/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 15 e 16/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 20/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades 02 a 07/12 - Semana de Estudos 09 a 14/12 - Semana de Exames	

Outras informações relevantes

(1) Art. 56 do Regimento Geral de Graduação: São condições para aprovação: II - nas disciplinas em que nota e frequência são adotadas como forma de avaliação – obter **nota final** igual ou superior a 5,0 (cinco vírgula zero) e a frequência mínima estabelecida para a disciplina no Catálogo dos Cursos de Graduação; a frequência mínima de 75%.

(2) **Sobre o Abono de Faltas:** os critérios do Abono de Faltas são definidos pelo artigo 72, do Regimento Geral de Graduação.

(3) De acordo com a **Deliberação CG 2022/01** sobre **PROVA SUBSTITUTIVA EM CASO DE FALTA JUSTIFICADA POR COVID-19**, a CG estabelece que o exame final poderá substituir a avaliação no dia de faltas abonadas pelo inciso V do artigo 72, exceto se o(a) estudante comprovar que a ausência foi motivada por suspeita ou contágio por COVID-19. Nessas situações – suspeita ou contágio comprovado por COVID-19 – o(a) estudante terá direito a reposição da atividade avaliativa, desde que componha sua média final, em data a ser combinada com o docente responsável, não podendo a prova de exame final ser utilizada para fins de substituição.

(4) Quaisquer alterações no PDE, propostas pelo(a) Docente ou Discentes, no transcorrer do semestre, só poderão ser realizadas mediante a concordância do(a) Docente e Discentes, e autorização da Comissão de Graduação.

O conteúdo da disciplina será dividido em cinco partes de acordo com o programa vigente. Todo material apresentado (slides, resumos dos seminários, programa da disciplina e outros dados) será disponibilizado no Google à medida que o conteúdo for ministrado.

SEGUEM A EMENTA, O PROGRAMA E A BIBLIOGRAFIA

Código: QF535								
Nome: Introdução à Química Quântica								
Nome em Inglês: Introduction to Quantum Chemistry								
Nome em Espanhol: Introducción a la Química Cuántica								
Tipo de Disciplina: Semanal								
Tipo de Aprovação: Nota e Frequência								
Característica: Regular								
Frequência: 75%								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: Semestral / 2º Período - períodos pares								
Exige Exame: Sim								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
4	-	-	2	-	-	4	15	6
Ocorrência nos Currículos: 05, 56								
Pré-requisitos: 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:								
<p>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.</p> <p>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</p> <p>Falhas, fraquezas e tentativas de correção do modelo de Bohr.</p> <p>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;</p> <p>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.</p> <p>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 H₂⁺ 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.</p> <p>VI. Atividades Orientadas: O ensino da química quântica no colégio.</p>								

Bibliografia Básica

- 1) MCQUARRIE, D. A.; SIMON, J. D.; **Physical Chemistry: A Molecular Approach**; University Science Books, New York (1997).
- 2) LEVINE, I. N.; **Physical Chemistry**; McGraw Hill, New York, 6a ed. (2008)
- 3) MARTINS, R. A.; ROSA, P. S.; **História da Teoria Quântica**; Editora Livraria da Física, São Paulo (2014).

Bibliografia Complementar

- 1) GIBERTI, A.; **Origens Históricas da Física Moderna**, Fundação Calouste Goulbekian, São Paulo (1982)
- 2) GAMOW, G.; **Thirty Years that Shook Physics: The Story of Quantum Theory**, Dover, New York (1985)
- 3) HOFFMAN, B.; **The Strange Story of the Quantum**, Dover, New York (1985),
- 4) FEYNMAN, R.; **A Estranha Teoria da Luz e da Matéria**, Editora Senai, São Paulo (2018).
- 5) PIZA, A. F. R. T.; **Schrödinger & Heisenberg: A Física Além do Senso Comum**; Odysseus Ed., 2ª ed., São Paulo (2007).
- 6) VALADARES, E. C. **Newton, A Órbita da Terra em um Copo D'água**; Odysseus Ed., São Paulo (2007).
- 7) GAVROGLU, K.; SIMÕES, A.; **Neither Physics Nor Chemistry: A History of Quantum Chemistry**, MIT Press, New York (2011).