

Aula/Semana (período)	Unidade (Tema principal)	Sub-unidades (Sub-temas)	Objetivos gerais e/ou específicos	Atividades teóricas e recursos/ferramentas de EaD	Atividades práticas e recursos/ferramentas de EaD
Aula 1 21/04/2020	Breve revisão dos tópicos considerados nas cinco primeiras semanas de aula	1. Os postulados da Mecânica Quântica; 2. Aplicações da equação de Schrödinger no estudo de alguns sistemas modelo; 3. Momento angular e o átomo de Hidrogênio; 5. O método variacional; 6. Estado fundamental do átomo de Hélio.	Partes 1, 2 e 3: Revisar os conceitos fundamentais para o desenvolvimento da disciplina através da apresentação de exemplos ilustrativos. Partes 3 e 4: Apresentar e formalizar matematicamente um dos métodos de aproximação utilizados no estudo das propriedades em sistemas atômicos e moleculares com a aplicação prática no estudo de um sistema modelo.	1. Disponibilização de transparências e notas de aula sobre cada um dos tópicos considerados nas cinco primeiras semanas de aula na plataforma Moodle da UFABC; 2. Como se trata de um feriado, proponho a disponibilização de um horário de atendimento para dúvidas das 14 às 16h (horário previsto para a aula) através de chat realizado na plataforma Google Meet da UFABC.	1. Resolução de um conjunto de exercícios com o objetivo de revisar os principais conceitos envolvidos na parte inicial do curso. Atividade para entrega na aula do dia 23/04/2020.
Aula 2 23/04/2020	<i>Spin</i> -orbitais e o princípio de exclusão de Pauli	1. Funções de <i>spin</i> e o papel da anti-simetria na descrição do estado fundamental do átomo de Hélio; 2. Determinação da funções de onda (escritas em termos de <i>spin</i> -orbitais) para as configurações $1s^2$ e $1s^1 2s^1$ do átomo de Hélio e obtenção dos respectivos termos espectroscópicos em termos das Regras de Hund.	Avaliar a contribuição das funções de <i>spin</i> na descrição da função de onda e analisar a influência das mesmas na determinação da energia dos estado fundamental do átomo de Hélio.	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet da UFABC; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	1. Entrega da lista de exercícios propostos na aula do dia 21/04/2020; 2. Resolução de um exercício referente aos conteúdos discutidos para entrega na aula do dia 28/04/2020.
Aula 3 28/04/2020	Estados excitados do átomo de hélio	Determinação das energias para os estados excitados do átomo de Hélio escritas em termos das integrais de	Avaliar a contribuição das funções de <i>spin</i> na descrição da função de onda e analisar a influência	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização	1. Entrega do exercício proposto na aula do dia 23/04/2020; 2. Resolução de um

		Coulomb e de troca; 2. Diagrama de energia para o átomo de Hélio no estado excitado $1s^12s^1$ e avaliação da influência da inclusão dos efeitos de interação intereletrônica (interação de Coulomb e interação de troca).	das mesmas na determinação da energia dos estado excitado $1s^12s^1$ do átomo de Hélio.	da plataforma Google Meet da UFABC; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	exercício referente aos conteúdos discutidos para entrega na aula do dia 30/04/2020.
Aula 4 30/04/2020	Átomos multieletrônicos	1. Expressão para o Hamiltoniano de um sistema de muitos elétrons; 2. Anti-simetria da função de onda e determinantes de Slater; 3. Determinação do valor médio para a energia do estado fundamental de um átomo multieletrônico e interpretação física das contribuições de energia não-interagente e média da energia de repulsão (integrais de Coulomb e de troca).	Generalizar as técnicas e procedimentos discutidos nas duas aulas anteriores no estudo de átomos multieletrônicos.	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet da UFABC; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	1. Entrega do exercício proposto na aula do dia 28/04/2020; 2. Resolução de um exercício referente aos conteúdos discutidos para entrega na aula do dia 05/05/2020.
Aula 5 05/05/2020	Teoria do orbital molecular - Parte I	1. Descrição quântica de sistemas moleculares: aplicação prática no estudo do íon molecular H_2^+ ; 2. Separação eletrônica e nuclear e a aproximação de Born-Oppenheimer.	Apresentar os conceitos que fundamentam a teoria do orbital molecular e aplicar os mesmos na descrição da estrutura eletrônica do íon molecular H_2^+ .	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet da UFABC; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na	1. Entrega do exercício proposto na aula do dia 30/04/2020; 2. Resolução de um exercício referente aos conteúdos discutidos para entrega na aula do dia 07/05/2020.

				plataforma Moodle da UFABC.	
Aula 6 07/05/2020	Teoria do orbital molecular - Parte II: Moléculas diatômicas	<ol style="list-style-type: none"> 1. Aplicações da teoria do orbital molecular no estudo de moléculas diatômicas; 2. Definição da base de orbitais atômicos; 3. Determinação das representações matriciais relevantes em termos da integrais envolvendo o operador Hamiltoniano e das integrais de recobrimento; 3. Obtenção e representação dos orbitais ligantes e antiligantes para o íon molecular H_2^+; 4. Diagramas de níveis energéticos com o ordenamento dos orbitais moleculares para as moléculas de CO e NO. 	Aplicar a teoria do orbital molecular no estudo das propriedades eletrônicas de moléculas diatômicas.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet da UFABC; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Entrega do exercício proposto na aula do dia 05/05/2020; 2. Resolução de um exercício referente aos conteúdos discutidos para entrega na aula do dia 12/05/2020.
Aula 7 12/05/2020	Teoria do orbital molecular - Parte III: Moléculas poliatômicas	<ol style="list-style-type: none"> 1. Generalização da teoria do orbital molecular para o caso de sistemas poliatômicos; 2. Definição da base de orbitais atômicos; 3. Determinação das representações matriciais relevantes; 4. Resolução do problema de autovalores generalizado; 5. Ocupação dos orbitais de acordo com o "diagrama de 	Generalizar as técnicas e procedimentos discutidos nas duas aulas anteriores para o estudo de moléculas poliatômicas.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet da UFABC; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Entrega do exercício proposto na aula do dia 07/05/2020; 2. Resolução de um exercício referente aos conteúdos discutidos para entrega na aula do dia 14/05/2020.

		linhas”; 6. Expressão geral para o cálculo de energia.			
Aula 8 14/05/2020	Métodos aplicados a moléculas orgânicas semi-empíricos	1. O método de Hückel simples (HMS, <i>simple Hückel method</i>) aplicado ao estudo de sistemas conjugados; 2. Aplicações práticas do HMS no estudo das moléculas de etileno e de benzeno; 3. Generalização matemática dos resultados; 4. Breve discussão sobre o método de Hückel extendido (EHM, <i>extended Hückel method</i>).	Apresentar uma formulação teórica alternativa para a descrição das propriedades eletrônicas de sistemas poliatômicos com elétrons em orbitais deslocalizados do tipo π .	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet da UFABC; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	1. Entrega do exercício proposto na aula do dia 12/05/2020; 2. Utilização do programa de domínio público Hückel desenvolvido pela Aix-Marseille Université para a visualização dos orbitais moleculares e determinação do diagrama de níveis de energia para a molécula de 1,3-Butadieno; 3. Resolução de um exercício referente aos conteúdos discutidos para entrega na aula do dia 19/05/2020.
Aula 9 19/05/2020	O método Hartree-Fock	1. As equações de Hartree-Fock; 2. Interpretação das soluções para as equações de Hartree-Fock: teorema de Koopman's e teorema de Brillouin; 3. Introdução de conjuntos de bases e as equações de Roothaan-Hall; 4. O procedimento de campo auto-consistente.	Apresentar os conceitos básicos envolvidos na formalização do método Hartree-Fock e interpretar o significado físico das equações obtidas.	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet da UFABC; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	1. Entrega do exercício proposto na aula do dia 14/05/2020; 2. Resolução de um exercício referente aos conteúdos discutidos para entrega na aula do dia 19/05/2020.
Aula 10 21/05/2020	Funções de base	1. Representação matemática e análise das vantagens e desvantagens	Introduzir o conceito de conjuntos de base e avaliar de forma crítica as	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos	1. Entrega do exercício proposto na aula do dia 26/05/2020;

		na utilização de funções hidrogenóides, funções de Slater e funções gaussianas para a representação de sistemas multieletrônicos; 2. Nomenclatura e descrição dos principais conjuntos de base utilizados em cálculos de estrutura eletrônica.	diferentes possibilidades de escolha para as funções matemáticas que compõem tais conjuntos.	alunos através da utilização da plataforma Google Meet da UFABC; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	2. Utilização do programa de domínio público NWChem para a representação gráfica e a comparação entre os diferentes tipos de função de base; 3. Resolução de um exercício referente aos conteúdos discutidos para entrega na aula do dia 28/05/2020.
Aula 11 26/05/2020	Aplicações práticas do método Hartree-Fock	1. Modelo de base mínima STO-3G para representação do orbital 1s da molécula de H ₂ ; 2. Cálculo de campo auto-consistente para a molécula de H ₂ utilizando o conjunto de funções de base STO-3G; 3. Cálculo de campo auto-consistente para o íon HeH ⁺ utilizando o conjunto de funções de base STO-3G.	Aplicar o método Hartree-Fock na descrição de alguns sistemas modelo.	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet da UFABC; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	1. Entrega do exercício proposto na aula do dia 19/05/2020; 2. Resolução de um exercício referente aos conteúdos discutidos para entrega na aula do dia 26/05/2020.
Aula 12 28/05/2020	Modelos quânticos aplicados ao espectro rotacional e vibracional - Parte I	1. Descrição da interação da radiação eletromagnética com sistemas poliatômicos através da utilização da aproximação de dipolo; 2. Definição do Hamiltoniano de interação e representação de auto-estados dependentes do tempo; 3. A aproximação de resposta linear e a regra de	Discutir um modelo de aproximação utilizado na descrição da interação da radiação eletromagnética com sistemas multieletrônicos.	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet da UFABC; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na	1. Entrega do exercício proposto na aula do dia 26/05/2020; 2. Resolução de um exercício referente aos conteúdos discutidos para entrega na aula do dia 02/06/2020.

		ouro de Fermi.		plataforma Moodle da UFABC.	
Aula 13 02/06/2020	Modelos quânticos aplicados ao espectro rotacional e vibracional - Parte II	<ol style="list-style-type: none"> 1. Obtenção do espectro vibracional de uma molécula diatômica de acordo com a aproximação harmônica; 2. Transições permitidas e transições proibidas; 3. Discussão da diferença entre o espectro de absorção obtido no modelo harmônico e o espectro real em termos dos efeitos de heterogeneidade e anharmonicidade; 4. Generalização para o caso de moléculas poliatômicas através da descrição em termos de um conjunto de osciladores harmônicos unidimensionais; 5. Modos normais de vibração. 	Aplicar a aproximação harmônica para obter o espectro vibracional de sistemas diatômicos e avaliar as limitações do modelo frente a comparação com os resultados experimentais.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet da UFABC; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Entrega do exercício proposto na aula do dia 28/05/2020; 2. Resolução de um exercício referente aos conteúdos discutidos para entrega na aula do dia 04/06/2020.
Aula 14 04/06/2020	Espectroscopia de ressonância magnética nuclear (NMR)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Descrição do problema de interação de um <i>spin</i> isolado com um campo magnético estático: taxas de transição induzidas pelo campo magnético e espectro de energia; 2. Descrição do problema de interação de dois <i>spins</i> isolados com um campo magnético estático: taxas de transição induzidas pelo campo magnético e espectro de energia; 	Descrever sistemas simples sob a ação de um campo magnético estático e determinar algumas propriedades características de tal processo de interação.	<ol style="list-style-type: none"> 1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet da UFABC; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Entrega do exercício proposto na aula do dia 02/06/2020; 2. Resolução de um exercício referente aos conteúdos discutidos para entrega no dia 06/06/2020.

		3. Breve discussão sobre dinâmica de <i>spin</i> e NMR pulsado.			
Aula 15 Retorno das atividades presenciais	Revisão	Acolhimento e esclarecimento das dúvidas que, por ventura, tenham permanecido durante o período de aulas realizadas no formato EaD.			
Aula 16 Retorno das atividades presenciais	Prova				