

| Caracterização da disciplina |                             |                     |                                   |               |          |               |             |      |      |
|------------------------------|-----------------------------|---------------------|-----------------------------------|---------------|----------|---------------|-------------|------|------|
| Código da disciplina:        | BCK0104-15                  | Nome da disciplina: | Interações Atômicas e Moleculares |               |          |               |             |      |      |
| Créditos (T-P-I):            | (3-0-4)                     | Carga horária:      | 3 horas                           | Aula prática: | x        | Câmpus:       | Santo André |      |      |
| Código da turma:             | NA3BCK0104-15SA             | Turma:              | A3                                | Turno:        | Nocturno | Quadrimestre: | 1           | Ano: | 2020 |
| Docente(s) responsável(is):  | João Nuno Barbosa Rodrigues |                     |                                   |               |          |               |             |      |      |

| Alocação das turmas |         |                                   |                                   |                                   |       |        |
|---------------------|---------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|-------|--------|
|                     | Segunda | Terça                             | Quarta                            | Quinta                            | Sexta | Sábado |
| 8:00 - 9:00         |         |                                   |                                   |                                   |       |        |
| 9:00 - 10:00        |         |                                   |                                   |                                   |       |        |
| 10:00 - 11:00       |         |                                   |                                   |                                   |       |        |
| 11:00 - 12:00       |         |                                   |                                   |                                   |       |        |
| 12:00 - 13:00       |         |                                   |                                   |                                   |       |        |
| 13:00 - 14:00       |         |                                   |                                   |                                   |       |        |
| 14:00 - 15:00       |         |                                   |                                   |                                   |       |        |
| 15:00 - 16:00       |         |                                   |                                   |                                   |       |        |
| 16:00 - 17:00       |         |                                   |                                   |                                   |       |        |
| 17:00 - 18:00       |         |                                   |                                   |                                   |       |        |
| 18:00 - 19:00       |         |                                   | Atendimento online <sup>(a)</sup> |                                   |       |        |
| 19:00 - 20:00       |         |                                   |                                   | Atendimento online <sup>(a)</sup> |       |        |
| 20:00 - 21:00       |         |                                   |                                   | Atendimento online <sup>(a)</sup> |       |        |
| 21:00 - 22:00       |         | Atendimento online <sup>(a)</sup> |                                   |                                   |       |        |
| 22:00 - 23:00       |         | Atendimento online <sup>(a)</sup> |                                   |                                   |       |        |

<sup>(a)</sup> Em substituição às aulas e horários de atendimento definidas no plano original da disciplina (ambas de carácter presencial), teremos horários de atendimento online através do chat e fórum da plataforma Moodle (à qual todos os alunos têm, em princípio, acesso), bem como através de chamadas de vídeo (Jitsi, Google Hangouts/Meet, Skype ou outro) sempre que os alunos e o professor achem necessário. Estes horários de atendimento online ocorrerão todas as semanas nas horas das aulas (originalmente semanais às terças-feiras e quinzenais às quintas-feiras) e nos horários de atendimento presencial (originalmente semanais às quartas-feiras).

| Planejamento da disciplina  |               |   |                                 |   |
|---|---------------|---|---------------------------------|---|
| Objetivos gerais  |               |   |                                 |   |
| Apresentar o uso da teoria quântica na compreensão das propriedades microscópicas da matéria, das forças de interação entre átomos e moléculas e das formas de estruturação da matéria, suas consequências e aplicações tecnológicas.   |               |   |                                 |   |
| Objetivos específicos   |               |   |                                 |   |
| Adquirir conhecimento, intuição e habilidade matemática em situações físicas envolvendo: <ol style="list-style-type: none"> <li>1- Teoria da ligação de valência.</li> <li>2- Teoria do Orbital Molecular.</li> <li>3- Tipos de interações entre as moléculas.</li> <li>4- Interações moleculares em gases, líquidos e sólidos.</li> <li>5- Propriedades físicas de líquidos e sólidos com base nas interações entre seus constituintes.</li> </ol> |               |   |                                 |   |
| Ementa  |               |   |                                 |   |
| Fundamentos quânticos de ligação química; Teoria da ligação de valência; Teoria do Orbital Molecular; Interações Elétricas entre moléculas; Interações moleculares em líquidos; Introdução à física da matéria condensada: Estruturas Cristalinas, Teoria de bandas e propriedades dos materiais.   |               |   |                                 |   |
| Conteúdo programático   |               |   |                                 |   |
| Semana  | Datas         | Conteúdo  | Estratégias didáticas           | Avaliação   |
| 1   | 20/04 a 24/04 | Fundamentos Mecânico quânticos da teoria (aproximação de Born- Oppenheimer). Teoria da ligação de valência, moléculas diatômicas e poliatômicas. Teoria do Orbital molecular: Fundamentos mecânico-quânticos da Teoria. | Vídeos expositivos              |   |
|   | 24/04 e 27/04 | Lista de Exercícios Online #3   |                                 | Questões de cálculo e escolha múltipla (no Moodle)            |
| 2   | 27/04 a 01/05 | Combinações lineares de orbitais atômicos. Moléculas diatômicas.  | Vídeos expositivos              |   |
|   |               | Revisões, exercícios e dúvidas.   | Vídeos revisão e chamadas vídeo |   |
|   | 2/05          | Mini-teste #1   |                                 | Questões cálculo, discursivas e escolha múltipla (no Moodle). |

|    |                      |  |  |  |
|----|----------------------|--|--|--|
| 3  | 04/05 a 08/05        | Interacções intermoleculares. Interacções elétricas das moléculas.   | Vídeos expositivos                     |  |
|    | 08/05 e 11/05        | Lista de Exercícios Online #4  |  | Questões de cálculo e escolha múltipla (no Moodle)             |
| 4  | 11/05 a 15/05        | Forças Intermoleculares: ião-dipolo, ião-dipolo induzido, forças de dispersão, ligações de hidrogénio.           | Vídeos expositivos                     |  |
| 5  | 18/05 a 22/05        | Introdução aos sólidos. Estruturas e redes Cristalinas. Propriedades dos Sólidos. Introdução à Teoria de Bandas. | Vídeos expositivos                     |  |
|    | 22/05 e 25/05        | Lista de Exercícios Online #5  |  | Questões de cálculo e escolha múltipla (no Moodle)             |
| 6  | 25/05 a 29/05        | Tópicos contemporâneos de Matéria Condensada 1: condutores, isoladores e semi-condutores; magnetismo;            | Vídeos expositivos                     |  |
|    |                      | Revisões, exercícios e dúvidas.  | Vídeos revisão e chamadas vídeo        |  |
|    | 30/05                | Mini-teste #2  |  | Questões cálculo, discursivas e escolha múltipla (no Moodle).  |
| 7  | 01/06 a 05/06        | Tópicos contemporâneos de Matéria Condensada 2: superconductividade; materiais 2D; metais estranhos;             | Vídeos expositivos                     |  |
|    |                      | Revisões, exercícios e dúvidas.  | Vídeos revisão e chamadas vídeo        |  |
|    | 06/06                | Entrega do Trabalho de Pesquisa Bibliográfica (escritos e vídeo)   |  | Trabalho escrito e vídeo apresentação.                         |
| S1 | 09/06 <sup>(1)</sup> | Aula presencial de revisões, exercícios e dúvidas.   | Aula presencial de revisões e dúvidas. |  |
|    | 11/06 <sup>(1)</sup> | Prova Final  |  | Questões cálculo, discursivas e escolha múltipla (presencial). |

|    |                      |                       |  |
|----|----------------------|-----------------------|--|
| S2 | 18/06 <sup>(1)</sup> | Prova substitutiva.   | Questões cálculo, discursivas e escolha múltipla (presencial). |
| S3 | 25/06 <sup>(1)</sup> | Prova de recuperação. | Questões cálculo, discursivas e escolha múltipla (presencial). |

<sup>(1)</sup> Sendo uma actividade necessariamente presencial, a data da sua realização ficará condicionada à retomada das actividades académicas presenciais. Pode ter que ser adiada caso as actividades presenciais sejam adiadas para lá de 6 de Junho.

#### Descrição dos instrumentos e estratégias didáticas para as aulas

A matéria da disciplina será ministrada assincronamente sob o formato de vídeo-aula.

Estas vídeo-aulas seguirão de perto o formato das aulas presenciais pré-ECE: slides semi-completos, que vão sendo preenchidos, anotados e comentados pelo professor.

Cada aula será composta por 3 a 4 vídeos com duração entre 20 a 40 minutos.

Estes vídeos serão disponibilizados na página Moodle da disciplina em formatos diversos: (i) arquivo vídeo para download; (ii) link para vídeo no YouTube; (iii) link para vídeo interactivo;

Os PDFs dos slides anotados das aulas continuarão a ser colocados na página da disciplina no Moodle, tal como antes da interrupção das actividades académicas presenciais.

#### Descrição dos instrumentos para os horários de atendimento aos alunos

O formato do atendimento privilegiará o chat e o fórum da página Moodle da disciplina, bem como o chat da página da disciplina do Facebook (recentemente criada).

Estarei também disponível para atendimento via chamada de voz e/ou vídeo (Jitsi, Google Meet, ou outros).

#### Descrição dos instrumentos e critérios de avaliação qualitativa

##### Conceito Final

O conceito final (CF) será dado por

$$CF = 0.15*T1 + 0.15*T2 + 0.4*PF + 0.2*TPB + 0.1*EX$$

onde

T1 = Mini-teste #1 online (dissertativa, cálculo e escolhas múltiplas).

T2 = Mini-teste #2 online (dissertativa, cálculo e escolhas múltiplas).

PF = Prova Final presencial (dissertativa, cálculo e escolhas múltiplas).

TPB = Trabalho de Pesquisa Bibliográfica (trabalho escrito + apresentação oral).

EX = Listas de Exercícios Online (cálculo e escolhas múltiplas).

Haverá um bónus de até 10% em cada actividade online (i.e. T1, T2, TPB e os três EX), para alunos participantes no Bónus-Parceiro (ver descrição em baixo).

#### Formato dos componentes da avaliação

##### Listas de Exercícios Online (EX):

- Com questões de cálculo e escolhas múltiplas.

- Em ECE teremos 3 listas que se somarão às 2 listas já realizadas em pré-ECE.
- Realizadas quinzenalmente na página da disciplina do Moodle (entre as 9h00 de sexta-feira e as 21h00 de segunda-feira).
- Datas das Listas Online a realizar em ECE: Lista #3 entre **24-27/Abril**; Lista #4 entre **8-11/Maio**; Lista #5 entre **22-25/Maio**.
- Só as quatro melhores listas de cada aluno contarão para a nota.

#### Mini-testes Online (T1 e T2):

- Com questões dissertativas, de cálculo e escolha múltipla.
- Realizados através da plataforma Moodle.
- O T1 cobrirá a primeira parte da matéria e será realizado no **dia 2/Maio**.
- O T2 cobrirá a segunda parte da matéria e será realizado no **dia 30/Maio**.

#### Trabalho de Pesquisa Bibliográfica (TPB):

- Trabalho individual. Cada aluno terá que entregar:
  1. Uma parte escrita com um máximo de duas páginas (duas colunas, fonte 12, Arial), incluindo título, figuras e referências bibliográficas.
  2. Vídeo-apresentação de 1 minuto.
- A parte escrita valerá 60% da nota do trabalho, valendo a vídeo-apresentação 40%.
- Os temas serão disponibilizados pelo professor **até ao dia 29/Abril**.
- Cada aluno deverá comunicar ao professor o tema que escolheu **até ao dia 6/Maio**.
- A data limite para entrega do trabalho (escrito e vídeo) será o **dia 6/Junho até às 21h00**.

#### Prova Final (PF):

- De carácter presencial (condicionalmente marcada para o **dia 11/Junho**).
- Com questões dissertativas, de cálculo e escolha múltipla.
- Cobrirá toda a matéria.

#### Bónus-Parceiro:

- **Objectivo:** estimular comunicação e apoio entre alunos durante o período de distanciamento social.
- Cada aluno pode escolher, no início do ECE, até dois colegas (da sua turma ou de uma das outras turmas: A3-diurna, B3-diurna, A3-nocturna, B3-nocturna).
- Por cada um desses parceiros que completar uma dada actividade online com nota mais alta do que 30%, o aluno receberá um bónus de 5% na sua nota nessa actividade online. A nota+bónus não poderá ser mais alta do que 10.
- Não é necessário que as escolhas de parceiros sejam recíprocas.

Exemplo: Suponhamos que o aluno A obtém a nota  $N'$  numa dada actividade online. Os seus dois parceiros, B e C, também realizam essa actividade e ambos conseguem uma nota maior do que 30%. Então, a nota final do aluno A nessa actividade será dada por  $N = 1,10 * N'$  (que não poderá ser maior do que 10).

#### Prova substitutiva e Recuperação

A prova substitutiva terá carácter presencial e ficará condicionalmente marcada para o **dia 18/Junho**. Esta só poderá ser feita por alunos que não tiverem feito a Prova Final (de carácter presencial), com devida justificativa de falta (resolução ConsEPE 227).

A prova de recuperação (REC) ficará condicionalmente marcada para o **dia 25/Junho**. Ela cobrirá todo o conteúdo da disciplina. Esta poderá ser feita pelos alunos que obtiverem conceitos D e F. O conceito final (CFrec), neste caso, será dado pela fórmula:

$$CFrec = 0.4*CF + 0.6*REC$$

**Critérios de Presença**

O curso exige presença mínima. Esta corresponde à realização da avaliação presencial (Prova Final ou Prova Substitutiva).

**Referências bibliográficas básicas**

1. TIPLER, Paul A.; LLEWELLYN, Ralph A, Física Moderna. 3 ed. : LTC, 2006.
2. ATKINS, Peter, Físico Química. 7ª ed. : LTC, 2002. vols. 1 e 2.
3. SHRIVER, D. F; ATKINS, P. W. Química Inorgânica .3 ed. : Bookman, 2003.

**Referências bibliográficas complementares**

1. BALL, David W. Físico Química, : Thomson, 2005. v. 1 e 2.
2. LEVINE, Ira N. Quantum chemistry. 6th ed. : Prentice Hall, 2008.
3. LEE, J D. Química inorgânica não tão concisa. : Edgard Blucher, 1999.
4. MOORE, Walter John. Físico química. Edgard Blucher, 1976.
5. MCQUARRIE, Donald A; SIMON, John D. Physical chemistry: a molecular approach. University Science Books, 1997.
6. KITTEL, Charles. Introdução à Física do Estado Sólido, 8ª Edição, LTC, 2006.

**Outras referências e materiais de suporte**

Além dos livros-texto base e dos complementares (listados acima), serão também disponibilizados materiais extras (slides anotados das aulas, folhas de exercícios e suas resoluções, correções das listas de exercícios online, vídeo-aulas e notas de outros professores, links para textos disponíveis na web).