

Plano de ensino da disciplina (PED)

Disciplina: NHT-4049 Estrutura da Matéria Avançada

Docente responsável: Maurício Domingues Coutinho Neto

Apresentamos a proposta de PED para o período do QS nos termos da Resolução Nº 240/2020 - CONSEPE, para a oferta da disciplina do segundo quadrimestre de 2020. Este plano complementa o plano original apresentado aos discentes e contempla apenas as atividades a serem desenvolvidas nas 12 semanas previstas no QS. Importante destacar que não há alterações na ementa da disciplina, seus objetivos, referências bibliográficas. Este PED, assim como comunicações com os alunos serão disponibilizados pelo SIGAA.

Semanas	Tema	Objetivos	Atividades teóricas, práticas e recursos/ferramentas remotas
1	Apresentação da disciplina – Revisão de conceitos básicos	Revisão dos postulados e conceitos básicos de MQ. Revisão da solução do átomo de H. Aspectos quantitativos do problema do potencial central e dos orbitais. Números quânticos e operadores associados. Ch 4 Mc Quarrie. Guia de estudo 1.	Aplicação do questionário diagnóstico. Aula assíncrona disponível no tidia ou google classroom. Discussões síncronas utilizando meets, google chat. Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h
2	Método variacional.	Introdução a conceitos fundamentais Método Variacional, Exemplos para o átomo de H e He. Expansão linear e determinante secular. Ch6 Mc Quarrie	Aula assíncrona disponível no tidia ou google classroom. Discussões síncronas utilizando meets, google chat. Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h
3	Átomos multieletrônicos I.	Átomos multi-eletrônicos I. Hamiltoniano eletrônico. Método de Hückel. Aproximação de Hartree e produto orbital. Anti-simetria da função de onda. Spin e determinantes de Slater. Ch 8 Mc Quarrie. Levine/Atkins.	Aula assíncrona disponível no tidia ou google classroom. Discussões síncronas utilizando meets, google chat.
4	Átomos multi-eletrônicos II.	Momento angular e configurações eletrônicas.	Setup de sistema para uso ao longo do curso. Argus lab, avogadro, orca. Testes do WebMo. Aula síncrona gravada e posteriormente divulgada. 3h
5	Born-Oppenheimer. Equações de Hartree-Fock.	Aproximação de Born-Oppenheimer. Ligações químicas em moléculas diatômicas. A molécula de H ₂ ⁺ . Equações de Hartree-Fock. Teorema de Koopman. Ch 2 Szabo, Ch 9 Mc Quarrie. Levine/Atkins.	Aula assíncrona disponível no tidia ou google classroom. Exercícios utilizando o Arguslab / Orca / Avogadro //WebMo. Cálculo simples para átomos, cátions e ânions. Cálculo simples para átomos, cátions e ânions. Propriedades periódicas dos elementos. Potencial de ionização e eletro afinidade. Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h
6	O método LCAO.	O método LCAO. Moléculas diatômicas. Ordem de ligação. Termos espectroscópicos em moléculas. Estados excitados	Aula assíncrona disponível no tidia ou google classroom. Exercícios utilizando o Arguslab / Orca / Avogadro //WebMo. Cálculos em Moléculas simples. H ₂ O, NH ₃ .

7	P1*		Prova assíncrona com 24 horas para resolução.
8	Aplicações de métodos de estrutura eletrônica.	Aplicações no cálculo de propriedades moleculares e termoquímica.	Aula assíncrona disponível no tidia ou google classroom. Exercícios utilizando o Arguslab / Orca / Avogadro //WebMo. Prática de Termoquímica. Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h
9	Aplicações de métodos de estrutura eletrônica.	Execução do projeto final do curso.	Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h
10	Aplicações de métodos de estrutura eletrônica.	Execução do projeto final do curso.	Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h
11	Apresentação de projeto	Apresentação do projeto	Apresentação do projeto
12	Apresentação de projeto	Apresentação do projeto	Apresentação do projeto
13	Avaliação de recuperação	-----	

Processos de avaliação. A avaliação final será baseada em uma provas realizada a distância (P1) valendo 40% da nota e a apresentação de um projeto final. 20% da nota serrá composta por atividades regulares a serem definidas ao longo do curso (resolução de exercícios e atividades).

Controle de presença. A frequência será medida com base na entrega das atividades propostas.

Atendimento aos alunos. Os alunos serão atendidos de forma assíncrona, por email, e nos horários da aula de **sexta-feira (semanal)** de maneira síncrona.

Atividades presenciais no retorno. Não serão necessárias.

Bibliografia

Bibliografia Básica:

- MCQUARRIE, Donald A; SIMON, John D. Physical chemistry: a molecular approach. California: University Science Books, 1997.
- SZABO, Attila; OSTLUND, Neil S. Modern quantum chemistry: introduction to advanced electronic structure theory. New York: Dover, 1996.
- P.W. Atikns, Molecular Quantum Mechanics, 4 ed. Oxford University Press, 2005.
- ATKINS, Peter. Físico-química, v. 1, Rio de Janeiro: LTC, 2002.

Bibliografia Complementar:

- SCHATZ, George C.; RATNER, Mark A.. Quantum mechanics in chemistry. New York: Dover Publications, 2002.
- PILAR, Frank L.. Elementary quantum chemistry. N.Y: Dover Publications, 2001.
- LEVINE, Ira N. Quantum chemistry. Harlow: Prentice Hall, 2008. M. Karpus, R.N. Porter, Atoms and Molecules.
- KOCH, Wolfram; HOLTHAUSEN, Max C. A chemist's guide to density functional theory. New York: Wiley-VHC, 2007.