

## Plano de Ensino e Mapa de Atividades

**Disciplina:** BCK0104-15 Interações Atômicas e Moleculares (2 turmas)

**Docente:** Gustavo Morari do Nascimento

**Quadrimestre:** Suplementar

**Carga horária total prevista:** 36 + 0 + 48 = 84

**RECOMENDAÇÃO:** Transformações Químicas; Física Quântica

**OBJETIVOS:** 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.

**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.

### **Metodologia:**

A disciplina será conduzida no Google Classroom e na medida do possível avisos importantes também serão colocados no SIGAA.

Código do curso no Google Classroom: b62bctw

Link: <https://classroom.google.com/u/0/c/MTQ1MTA0MzlyNDEx>

As interações síncronas serão realizadas via google meet.

As atividades serão, em resumo, organizadas da seguinte maneira:

**Segunda-feira:** Disponibilização do material da semana toda (na medida do possível irei disponibilizar o material na sexta-feira anterior a semana de aula) - atividade assíncrona.

**Quarta-feira:** Encontro com o professor (às quartas-feiras a cada quinze dias no horário das aulas) - atividade síncrona.

### **Procedimentos de Avaliação da Aprendizagem:**

A avaliação será composta da entrega de itens selecionados de três listas de exercícios, uma (P) prova e um (T) projeto em grupo. As listas ficaram disponíveis duas semanas antes da entrega e a prova ficará disponível por **72 horas** no google classroom e o projeto tem suas etapas de execução previstas no mapa de atividades abaixo. O Projeto consistirá no desenvolvimento de uma mídia (podcast ou vídeo aula) ou página na wiki sobre algum tema relacionado à ementa da disciplina. Nota final =  $(ML + P + T)/3$ , sendo ML a média aritmética das notas dos exercícios entregues das listas.

O conceito será atribuído conforme as seguintes porcentagens de aproveitamento: A (85 – 100%), B (70 – 85%), C (50 – 70%), D (40 – 50%), F (<40%). O estudante que obtiver média D ou F terá o direito de realizar uma prova de recuperação (REC). O conceito final será determinado pela seguinte média ponderada:  $(NF+2*REC)/3$ .

Horas	Tema principal	Objetivos específicos	Atividades práticas
Tempo de dedicação?	O que eles aprenderão?	Quais objetivos de aprendizagem devem ser alcançados?	Como demonstrarão?
<b>Setembro</b>			
1º semana (21-23/09) T + I 3 + 4 = 7	Apresentação do curso e Revisão de conceitos básicos de física quântica	Relembrar importantes conceitos para a melhor compreensão do curso	<b>Síncrono:</b> Apresentação do curso <b>(no horário da aula na quarta-feira)</b> <b>Assíncrono:</b> Ouvir os conteúdos do podcast e dos arquivos disponibilizados para leitura e estudo <b>-Lista de exercícios 1 (L1)</b>
2º semana (28-30/09) T + I 3 + 4 = 7	Revisão de conceitos básicos de mecânica quântica	Relembrar importantes conceitos para a melhor compreensão do curso	<b>Assíncrono:</b> Ouvir os conteúdos do podcast e dos arquivos disponibilizados para leitura e estudo
<b>Outubro</b>			
3º semana (05-07/10) T + I 3 + 4 = 7	Quantização do momento angular e da energia do átomo de hidrogênio. Orbitais atômicos	Entender os orbitais do átomo de hidrogênio. Conhecer os números quânticos e suas interpretações.	<b>Síncrono:</b> Sala de aula do Google Meet para discussão dos conteúdos disponibilizados nos textos e nos podcasts e esclarecimento de dúvidas sobre os exercícios propostos <b>(no horário da aula na quarta-feira)</b> <b>Assíncrono:</b> Ouvir os conteúdos do podcast e dos arquivos disponibilizados para leitura e estudo
4º semana (12-14/10) T + I 3 + 4 = 7	Spin do elétron. Princípio da exclusão de Pauli. Regras de seleção. Átomos multieletrônicos. Tabela periódica	Entender o spin do elétron e o princípio da exclusão, conseguir determinar a configuração eletrônica dos elementos.	<b>Assíncrono:</b> Ouvir os conteúdos do podcast e dos arquivos disponibilizados para leitura e estudo <b>-Lista de exercícios 2 (L2)</b> <b>(Entrega de itens selecionados da L1)</b>
5º semana (19-21/10) T + I 3 + 4 = 7	Fundamentos Mecânico quânticos da teoria (aproximação de Born-Oppenheimer). Teoria da	Entender a aproximação de Born-Oppenheimer e os conceitos básicos da teoria da ligação de valência.	<b>Síncrono:</b> Sala de aula do Google Meet para discussão dos conteúdos disponibilizados nos textos e nos podcasts e esclarecimento de dúvidas sobre os exercícios propostos

	ligação de valência, moléculas diatômicas e poliatômicas.		<b>(no horário da aula na quarta-feira)</b> <b>Assíncrono:</b> Ouvir os conteúdos do podcast e dos arquivos disponibilizados para leitura e estudo
6ª semana (26-28/10) T + I 3 + 4 = 7	Teoria do Orbital molecular: Combinações lineares de orbitais atômicos. Moléculas diatômicas.	Entender os conceitos básicos da teoria do orbital molecular, conseguir determinar a configuração eletrônica das moléculas diatômicas homonucleares dos primeiros dois períodos.	<b>Assíncrono:</b> Ouvir os conteúdos do podcast e dos arquivos disponibilizados para leitura e estudo
<b>Novembro</b>			
7ª semana (02-04/11) T + I 3 + 4 = 7	Teoria do Orbital molecular: Extensão	Entender os conceitos básicos do princípio variacional e algumas aplicações simples.	<b>Assíncrono:</b> Ouvir os conteúdos do podcast e dos arquivos disponibilizados para leitura e estudo <b>-Lista de exercícios 3 (L3)</b> <b>(Entrega de itens selecionados da L2)</b>
8ª semana (09-11/11) T + I 3 + 4 = 7	Estado sólido	Conhecer as estruturas principais de metais, sais, outros materiais cristalinos e alguns materiais não-cristalinos, saber calcular o fator de empacotamento.	<b>Síncrono:</b> Sala de aula do Google Meet para discussão dos conteúdos disponibilizados nos textos e nos podcasts e esclarecimento de dúvidas sobre os exercícios propostos <b>(no horário da aula na quarta-feira)</b> <b>Assíncrono:</b> Ouvir os conteúdos do podcast e dos arquivos disponibilizados para leitura e estudo
9ª semana (16-18/11) T + I 3 + 4 = 7	Estado sólido	Entender os conceitos de condutores, semicondutores e isolantes, e conhecer algumas aplicações de semicondutores dopados. Polímeros Condutores.	<b>Assíncrono:</b> Ouvir os conteúdos do podcast e dos arquivos disponibilizados para leitura e estudo
10ª semana	Estado sólido	Técnicas de caracterização da	<b>(Entrega de itens selecionados da L3)</b>

(23-25/11) T + I 3 + 4 = 7		estrutura do estado sólido	<p><b>Síncrono:</b> Sala de aula do Google Meet para discussão dos conteúdos disponibilizados nos textos e nos podcasts e esclarecimento de dúvidas sobre os exercícios propostos</p> <p><b>Assíncrono:</b> Ouvir os conteúdos do podcast e dos arquivos disponibilizados para leitura e estudo</p>
<b>Dezembro</b>			
11ª semana (30-02/12) T + I 3 + 4 = 7	<b>Prova 1</b>	Questões sobre os conceitos centrais do curso.	<p><b>P1- será disponibilizada no domingo para entrega na quarta-feira (prazo máximo)</b></p> <p><b>Entrega dos trabalhos em grupo (T)</b></p>
12ª semana (07-09/12) T + I 3 + 4 = 7	Avaliação do curso		<p><b>Síncrono:</b> Sala de aula do Google Meet para avaliação do curso.</p>
Recuperação (13-18/12)	<b>Recuperação</b>		<p><b>R- Será disponibilizada no domingo para entrega na quarta-feira (prazo máximo)</b></p> <p>.</p>

## Bibliografia

---

- TIPLER, P. A., LLEWELLYN, R.A., Física Moderna, Grupo Editorial Nacional (GEN) -LTC (2010).
- LEVINE, Ira N. Quantum chemistry. 6. ed. Harlow, USA: Prentice Hall, 2008. 751 p.
- ATKINS, Peter; DE PAULA, Julio. Physical chemistry. 8. ed. New York: Oxford University Press, 2006. 1064p.

### BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

- EISBERG, Robert et al. Física quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas. Rio de Janeiro: Câmpus, 1979. 928p.
- FEYNMAN, Richard P. et al. Lições de Física de Feynman. Porto Alegre: Bookman 2008. 416 p. GASIOROWICZ, Stephen. Quantum Physics. Hoboken, USA: Wiley 2003. 336 p.
- MCQUARRIE, Donald A. et al. Physical chemistry: a molecular approach. Sausalito, USA: University Science Books 1997. 1349 p.
- PAULING, Linus et al. Introduction to quantum mechanics: with applications to chemistry. New York, USA: Dover 1935.
- LEE, J. D. Química Inorgânica Não tão Concisa, Ed. Edgard Blücher LTDA, tradução da 4<sup>o</sup> edição inglesa, 1996.
- ATKINS, P.; DE PAULA, J.; FRIEDMAN, R. Quanta, Matéria e Mudança, uma abordagem molecular para a Físico-Química vol. 1 e 2, Tradução da 1<sup>o</sup> edição inglesa. Ed. LTC, 2011.
- LEVINE, I. N. Físico-Química vol. 1 e 2, Tradução da 6<sup>o</sup> edição inglesa. Ed. LTC 2012.
- CARUSO, Francisco; OGURI, Vitor. Física Moderna: origens clássicas e fundamentos quânticos. Rio de Janeiro: Elsevier, 2006.