

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 02/02/2021	Postulados da Mecânica Quântica e Aplicações práticas da equação de Schrödinger - Parte I	1. Os postulados da Mecânica Quântica e suas implicações físicas; 2. Revisão do problema do poço de potencial infinito unidimensional.	Revisar os postulados da mecânica quântica e o problema da partícula presa em um poço de potencial infinito. Apresentar e discutir a representação gráfica da função de onda e da densidade de probabilidade obtidas como solução do problema da partícula presa em um poço de potencial infinito.	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC; 4. Disponibilização de um script em phyton que permite gerar a função de onda e densidade de probabilidade para uma partícula no poço de potencial infinito.	1. Resolução de um conjunto de exercícios com o objetivo de revisar os principais conceitos envolvidos na parte inicial do curso (Aulas 1 e 2). Atividade para entrega na aula do dia 09/02/2021.
Aula 2 04/02/2021	Aplicações práticas da equação de Schrödinger - Parte II	1. O poço de potencial infinito bidimensional; 2. O poço de potencial infinito tridimensional; 3. Partícula confinada em um anel infinito.	Estudar e discutir as soluções para os problemas da partícula presa em um poço de potencial infinito bi- e tridimensional e da partícula confinada em um anel infinito. Mostrar a representação gráfica da função de onda e da densidade de	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC;	

			probabilidade obtidas como solução de alguns destes problemas.	3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	
Aula 3 09/02/2021	Aplicações práticas da equação de Schrödinger – Parte III	1. Momento angular e o átomo de Hidrogênio; 2. O átomo de hidrogênio: funções de onda e autovalores de energia.	Revisar as soluções para o problema do átomo de hidrogênio.	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet; 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 02/02/2021; 2. Resolução de uma lista de exercícios referente aos conteúdos discutidos nas Aulas 3 e 4 para entrega na aula do dia 16/02/2021.
Aula 4 11/02/2021	Aplicações práticas da equação de Schrödinger – Parte IV	1. O átomo de hidrogênio: interpretação do significado dos números quânticos; 2. Orbitais atômicos.	Revisar os conceitos fundamentais para o desenvolvimento da disciplina através da apresentação de exemplos ilustrativos. Apresentar e discutir a representação gráfica da função de onda e da densidade de probabilidade obtidas como solução do átomo de hidrogênio (orbitais e harmônicos esféricos).	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	
Aula 5 16/02/2021	Métodos de aproximação para	1. Métodos de aproximação para a função de onda;	Revisar os conceitos fundamentais para o desenvolvimento da	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa	1. Entrega da lista de exercícios propostos na aula do dia

	solução da equação de Schrödinger: Método variacional	2. Formalismo teórico do método variacional; 3. Aplicação no estudo do átomo de hidrogênio.	disciplina através da apresentação de exemplos ilustrativos.	dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	09/04/2021; 2. Resolução de uma lista de exercícios referente aos conteúdos discutidos nas Aulas 5 e 6 para entrega na aula do dia 23/02/2021.
Aula 6 18/02/2021	Aplicações do método variacional: Átomo de Hélio no estado fundamental	1. O método variacional; 2. Estado fundamental do átomo de Hélio.	Apresentar e formalizar matematicamente um dos métodos de aproximação utilizados no estudo das propriedades em sistemas atômicos e moleculares como aplicação prática no estudo de um sistema modelo.	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	
Aula 7 23/02/2021	Spin-orbitais e o princípio de exclusão de Pauli	1. Funções de spin e o papel da anti-simetria na descrição do estado fundamental do átomo de Hélio; 2. Determinação das funções de onda (escritas em termos de spin-orbitais) para as configurações $1s^2$ e	Avaliar a contribuição das funções de spin 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; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na	1. Entrega da lista de exercícios propostos na aula do dia 16/02/2021; 2. Resolução de uma lista de exercícios referente aos conteúdos discutidos nas Aulas 7 e 8 para entrega na aula do dia

		1s ¹ 2s ¹ do átomo de Hélio e obtenção dos respectivos termos espectroscópicos em termos das Regras de Hund.		plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	02/03/2021.
Aula 8 25/02/2021	Estados excitados do átomo de hélio	1. Determinação das energias para os estados excitados do átomo de Hélio escritas em termos das integrais de Coulomb e de troca; 2. Diagrama de energia para o átomo de Hélio no estado excitado 1s ¹ 2s ¹ e avaliação da influência da inclusão dos efeitos de interação intereletrônica (interação de Coulomb e interação de troca).	Avaliar a contribuição das funções de spin na descrição da função de onda e analisar a influência das mesmas na determinação da energia dos estado excitado 1s ¹ 2s ¹ do átomo de Hélio. Apresentar e discutir a representação gráfica dos orbitais do átomo de Hélio nos estados excitados e um diagrama fotofísico didático envolvendo as excitações neste átomo.	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	
Aula 9 02/03/2021	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	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; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula	1. Entrega da lista de exercícios propostos na aula do dia 23/02/2021; 2. Resolução de uma lista de exercícios referente aos conteúdos discutidos nas Aulas 9 e 10 para entrega na aula do dia 09/03/2021.

		das contribuições de energia não-interagente e média da energia de repulsão (integrais de Coulomb e de troca).		na plataforma Moodle da UFABC.	
Aula 10 04/03/2021	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; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	
Aula 11 09/03/2021	Teoria do orbital molecular - Parte II: Moléculas diatômicas	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; 4. Obtenção e representação dos orbitais ligantes e	Aplicar a teoria do orbital molecular no estudo das propriedades eletrônicas de moléculas diatômicas. Apresentar e discutir o diagrama dos orbitais moleculares para a molécula de O_2 : caso paramagnético.	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet; 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 02/03/2021; 2. Resolução de um exercício referente aos conteúdos discutidos nas Aulas 11 e 12 para entrega na aula do dia 16/03/2021.

		antiligantes para o íon molecular H_2^+ ; 5. Diagramas de níveis energéticos com o ordenamento dos orbitais moleculares para as moléculas de CO e NO.			
Aula 12 11/03/2021	Teoria do orbital molecular - Parte III: Moléculas poliatômicas	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 linhas"; 6. Expressão geral para o cálculo de energia.	Generalizar as técnicas e procedimentos discutidos nas duas aulas anteriores para o estudo de moléculas poliatômicas. Apresentar o diagrama dos orbitais para a molécula de diborano e discutir o uso de simetria adaptada para a representação da superposição de orbitais atômicos.	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	
Aula 13 16/03/2021	Prova 1				
Aula 14 18/03/2021	Métodos semi-empíricos aplicados a moléculas orgânicas	1. O método de Hückel simples (HMS, simple Hückel method) aplicado ao estudo de sistemas conjugados; 2. Aplicações práticas do HMS no estudo das moléculas de etileno e	Apresentar uma formulação teórica alternativa para a descrição das propriedades eletrônicas de sistemas poliatômicos com elétrons em	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet; 2. Gravação e	1. Entrega da lista de exercícios propostos na aula do dia 09/03/2021; 2. Utilização do programa de domínio público Hückel desenvolvido pela Aix-

		de benzeno; 3. Generalização matemática dos resultados; 4. Breve discussão sobre o método de Hückel extendido (EHM, extended Hückel method).	orbitais deslocalizados do tipo π . Trazer exemplos retirados de artigos da literatura envolvendo a aplicação do método HMS que apresentam bons resultados.	disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	Marceille 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 nas Aulas 14 e 15 para entrega na aula do dia 25/03/2021.
Aula 15 23/03/2021	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; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	
Aula 16 25/03/2021	Funções de base	1. Representação matemática e análise das vantagens e desvantagens na utilização de funções hidrogenóides, funções de Slater e funções gaussianas	Introduzir o conceito de conjuntos de base e avaliar de forma crítica as diferentes possibilidades de escolha para as funções matemáticas que compõem tais	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet; 2. Gravação e	1. Entrega da lista de exercícios propostos na aula do dia 18/03/2021; 2. Utilização do programa de domínio público NWChem para a representação

		para a representação de sistemas multieletrônicos; 2. Nomenclatura e descrição dos principais conjuntos de base utilizados em cálculos de estrutura eletrônica.	conjuntos.	disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	gráfica e a comparação entre os diferentes tipos de função de base; 3. Resolução de um exercício referente aos conteúdos discutidos nas Aulas 16 e 17 para entrega na aula do dia 01/04/2021.
Aula 17 30/03/2021	Aplicações práticas método Hartree-Fock	1. Modelo de base mínima STO-3G para representação do orbital 1s da molécula de H ₂ ; 2. Cálculo de campo autoconsistente para a molécula de H ₂ utilizando o conjunto de funções de base STO-3G; 3. Cálculo de campo autoconsistente 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; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	
Aula 18 01/04/2021	Aplicações práticas método Hartree-Fock	1. Modelo de base mínima STO-3G para representação do orbital 1s da molécula de H ₂ ; 2. Cálculo de campo autoconsistente para a molécula de H ₂ 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; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de	1. Entrega da lista de exercícios propostos na aula do dia 25/03/2021; 2. Resolução de um exercício referente aos conteúdos discutidos nas Aulas 18 e 19 para entrega na aula do dia 08/04/2021.

				transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	
Aula 19 06/04/2021	Aplicações práticas método Hartree-Fock	1. Cálculo de campo autoconsistente para o íon HeH^+ utilizando o conjunto de funções de base STO-3G.	Aplicar o método Hartree-Fock na descrição de alguns sistemas modelo. Em particular, mostrar e discutir os resultados para o íon HeH^+ obtidos em um cálculo do tipo HF/STO-3G.	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	
Aula 20 08/04/2021	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 autoestados dependentes do tempo; 3. A aproximação de resposta linear e a regra de ouro de Fermi.	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; 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 01/04/2021; 2. Resolução de um exercício referente aos conteúdos discutidos nas Aulas 20 e 21 para entrega na aula do dia 15/04/2021.
Aula 21 13/04/2021	Modelos quânticos aplicados ao espectro	1. Obtenção do espectro vibracional	Aplicar a aproximação harmônica para obter	1. Realização de aula em formato remoto	

	rotacional e vibracional - Parte II	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 anarmonicidade.	o espectro vibracional de sistemas diatômicos e avaliar as limitações do modelo frente a comparação com os resultados experimentais.	com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet; 2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	
Aula 22 15/04/2021	Modelos quânticos aplicados ao espectro rotacional e vibracional - Parte II	1. Generalização para o caso de moléculas poliatômicas através da descrição em termos de um conjunto de osciladores harmônicos unidimensionais; 2. 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.	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet; 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 08/04/2021; 2. Resolução de um exercício referente aos conteúdos discutidos para entrega na aula do dia 22/04/2021.
Aula 23 20/04/2021	Transições eletrônicas, estados excitados e fotoquímica.	1. Estudo das transições eletrônicas em sistemas de muitos elétrons.	Estudar as transições eletrônicas em sistemas de muitos elétrons. Apresentar e discutir o diagrama de Jablonski (fotofísica).	1. Realização de aula em formato remoto com participação ativa dos alunos através da utilização da plataforma Google Meet;	

				2. Gravação e disponibilização do vídeo da aula na plataforma Moodle da UFABC; 3. Disponibilização de transparências de aula na plataforma Moodle da UFABC.	
Aula 24 22/04/2021	Prova 2				
Aula 25 27/04/2021	Revisão para a prova de recuperação	Acolhimento e esclarecimento das dúvidas que, por ventura, tenham permanecido durante o período de aulas realizadas no formato remoto.			
Aula 26 29/04/2021	Prova de Recuperação				