

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 google classroom. Discussões síncronas utilizando meets, google chat. Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h + 2h
2	Método variacional.	Introdução a conceitos fundamentais Método Variacional, Exemplos para o átomo de H e He. Expansão linear e determinante secular. Ch8 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 + 2h
3	Átomos multieletrônicos I.	O Método de Hückel. Ordem de ligação.	Aula assíncrona disponível no tidia ou google classroom. Discussões síncronas utilizando meets, google chat. Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h + 2h
4	Átomos multi-eletrônicos I	Átomos multi-eletrônicos I. Hamiltoniano eletrônico. Aproximação de Hartree e produto orbital. Anti-simetria da função de onda. Spin e determinantes de Slater. Ch 9 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 + 2h

5	O método LCAO. Equações de Hartree-Fock.	O método LCAO. Equações de Hartree-Fock. Teorema de Koopman. Ch. 9/12 Mc. Quarrie. Ch2 Szabo.	Setup de sistema para uso ao longo do curso. Argus lab, avogadro, orca. Aula síncrona gravada e posteriormente divulgada. 2h + 2h
6	Moléculas. Aproximação de Born-Oppenheimer.	Aproximação de Born-Oppenheimer. Ligações químicas em moléculas diatômicas. A molécula de H_2^+ . Ch 2 Szabo, Ch 10 Mc Quarrie.	Arguslab / Orca / Avogadro Cálculo simples para átomos, cátions e ânions. Cálculo. Propriedades periódicas dos elementos. Potencial de ionização e eletro afinidade.
7	Moléculas.	A energia de determinantes. Moléculas diatômicas. Ch 2 Szabo, Ch 10 Mc Quarrie.	Aula assíncrona disponível no tidia ou google classroom. Exercícios utilizando o Arguslab / Orca / Avogadro Cálculos em Moléculas simples. H_2O , NH_3 .
8	P1*		Prova assíncrona com 72 horas para resolução.
9	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 Prática de Termoquímica. Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h
10	Aplicações de métodos de estrutura eletrônica.	Execução do projeto final do curso.	Atividade síncrona: discussão sobre o projeto . Discussões síncronas utilizando meets, google chat. 2h
11	Aplicações de métodos de estrutura eletrônica.	Execução do projeto final do curso.	Atividade síncrona: discussão sobre o projeto . Discussões síncronas utilizando meets, google chat. 2h
12	Apresentação de projeto	Apresentação do projeto final.	Apresentação do projeto/discussão no forum.
13	Avaliação de recuperação	-----	

Processos de avaliação. A avaliação final será baseada em uma provas realizada a distância (P1) valendo 35% da nota e a apresentação de um projeto final valendo também 35% da nota. 30% da nota será composta por atividades semanais a serem definidas ao longo do curso (resolução de exercícios e atividades). As apresentações do projeto final serão feitas por vídeo de maneira assíncrona.

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

Bibliografía

Bibliografía 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. Atkins, Molecular Quantum Mechanics, 4 ed. Oxford University Press, 2005.
- ATKINS, Peter. Físico-química, v. 1, Rio de Janeiro: LTC, 2002.

Bibliografía 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.