

Plano da disciplina BCK0104

Interações Atômicas e Moleculares

Quadrimestre Suplementar - 2021.1

Interações Atômicas e Moleculares é uma disciplina ditada no Programa de Bacharelado em Ciência e Tecnologia da UFABC com uma Carga Horária de de 3h teóricas mais 4h de estudo individual por semana (T.P.I 3.0.4). A disciplina terá ênfase na aplicação da teoria quântica na compreensão das estruturas e propriedades microscópicas da matéria (átomos, moléculas, e matéria condensada), forças de interação entre átomos e moléculas, e sua caracterização da matéria.

A ementa tem como conteúdo os fundamentos quânticos de ligação química, a teoria da ligação de valência, a teoria do orbital molecular, as interações elétricas entre moléculas, as interações moleculares em líquidos, dar uma introdução à física da matéria condensada principalmente a estruturas cristalinas, a teoria de bandas e propriedades dos materiais.

A disciplina será feita na plataforma MOODLE. Lá estarão os link às aulas assíncronicas de cada parte do Conteúdo Programático mostrado abaixo, no cronograma, como também as indicações para as aulas síncronicas, apostilas, provas e calculo de notas. As aulas assíncronicas serão vídeo-aulas previamente gravadas e postadas no canal do youtube. As síncronicas serão encontros semanais para tirar dúvidas e também serão gravadas e postadas no canal. Segue o link do youtube: <https://www.youtube.com/channel/UC7Yz6d0ABg-SwFOS0Qu1sPA/videos>

Objetivos específicos do curso:

1. Descrição de átomos por meio da teoria quântica.
2. Teoria da ligação de valência.
3. Teoria do orbital molecular.
4. Tipos de interações entre as moléculas.
5. Interações moleculares em gases, líquidos e sólidos.
6. Propriedades físicas de líquidos e sólidos com base nas interações entre seus constituintes.

Recomendação:

Física Quântica (BCK0103-15).
Estrutura da matéria (BCK0102).
Transformações Químicas (BCK0103-15).
Funções de várias variáveis (BCK0407).

Bibliografia Básica:

1. Físico-química. ATKINS, P.; de PAULA, J. Rio de Janeiro, 2004, v. 1 e 2.
2. Física Moderna. TIPLER, P. A.; LLEWELLYN, R. A.. Rio de Janeiro, 2006, capítulos 6, 7, 9 e 10..
3. Química Inorgânica. SHRIVER, D.F.; ATKINS, P.W.; OVERTON, T.L.; ROUKE, J.P.; WELLER, M.T.; ARMSTRONG, F.A. Bookman: Porto Alegre, 2008.
4. Princípios de Química - Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente. ATKINS, P.; JONES, L. Bookman: Porto Alegre, 2006.

Horários e Salas:

Neste quadrimestre as aulas serão todas as quartas-feiras no período diurno das 08:00 às 10:00 e quinzenal-2 nas sextas-feiras das 10:00 às 12:00 para a turma BB. Também nas quartas-feiras no período diurno das 10:00 às 12:00 semanal, e quinzenal-2 nas sextas-feiras das 08:00 às 10:00 para a turma A2.

Cronograma do Conteúdo Programático.

Aula	Data	Assunto
1	03/02	Apresentação da disciplina. Introdução aos conteúdos.
2	10/02	Equação de Schrödinger. Potenciais independentes do tempo. Oscilador Harmônico.
3	12/02	Quantização do momento angular e da energia do átomo de hidrogênio; Orbitais <i>s p d f</i> .
	17/02	Feriado. Reposição em 29 de abril (quinta-feira)
4	24/02	Spin do elétron, Princípio da exclusão de Pauli e regras de seleção. Tabela periódica
5	26/02	Fundamentos Mecânico-quânticos da teoria de ligação química (aproximação de Bohr-Oppenheimer). Teoria da ligação de valência - moléculas diatômicas e poliatômicas; Hibridização e ressonância.
6	03/03	Prova 1
7	10/03	Teoria do Orbital molecular: Fundamentos mecânico-quânticos da Teoria do orbital molecular. Comb. lineares de orbitais atômicos; Tipos de orbitais;
8	12/03	Moléculas diatômicas homo- e heteronucleares. Diagramas de energia em moléculas envolvendo os subníveis <i>s</i> e <i>p</i> .
9	17/03	Interações elétricas das moléculas. Forças Intermoleculares: Íon-Dipolo, Íon - Dipolo Induzido,
10	24/03	Forças de dispersão, Tensão superficial, Viscosidade, Função Distribuição Radial Líquidos.
11	26/03	Introdução ao Estado Sólido , Redes Cristalinas , Estruturas Cristalinas.
12	31/03	Teoria do elétron livre e Teoria de Bandas.
13	07/04	Propriedades Elétricas e Magnéticas dos Sólidos.
	09/04	Feriado. Reposição em 5 de maio (quarta-feira)
14	14/04	Prova 2
15	21/04	Prova Substitutiva
	23/04	Feriado. Reposição em 7 de maio (sexta-feira)

16	29/04	Divulgação dos resultados e vista online de provas.
17	05/05	Prova Recuperativa (REC)
18	07/05	Vista online de prova REC

As Provas:

As provas P1, P2, Psub e Prec também serão feitas via plataforma Moodle, disponíveis por 72 horas (quinta a noite, 23h30, a domingo às 23h30). Para a P1 envolverá os conteúdos dos tópicos T1 e T2 e, após início da prova, esta terá duração máxima de 3 horas e com apenas 1 tentativa. A P2 avaliará os conteúdos T3, T4, T5 e terá duração máxima de 4 horas, também com apenas 1 tentativa. Aqui as questões são múltipla escolha e dissertativas, e precisarão, na maioria dos casos, de cálculos. Para a Psub teremos as opções de P1sub e P2sub, sendo as mesmas normas citadas acima, respectivamente (quanto a disponibilidade, duração e tentativas).

A Prec avaliará todos os conteúdos, todos os tópicos, e terá uma duração máxima de 4 horas.

P1	04-07/03	Prova 1 (50%)
P2	15-18/04	Prova 2 (50%)
Psub	22-25/04	Prova Substitutiva (50 ou 100%)
REC	06-09/05	$NF=(Med+Rec)/2$

A nota Med acima descrita é a média aritmética das provas, $(P1+P2)/2$. A Psub só poderão fazê-la aquelas pessoas que façam uma solicitação justificada.

Conceitos.

A equivalência de notas por conceitos finais será como segue:

Conceitos	Faixas
A	entre 8.5 e 10
B	entre 7.0 e 8.4
C	entre 5.0 e 6.9
D	entre 4.5 e 5.0
F	entre 0.0 e 4.4

Para dinâmica de comunicação, informações gerais, avisos e imprevistos, também como sistema de mensagem e comunicação com o professor, poderão ser encontrados em ambiente moodle.
<https://moodle.ufabc.edu.br/>

Prof. Dr. Javier Acuña
<https://sites.google.com/site/disciplinascnh/>
Centro de Ciências Naturais e Humanas (CCNH)
Universidade Federal do ABC