

Plano de ensino da disciplina (PED)

Disciplina: CTQ-11 Estrutura Atômica e Molecular

Docentes responsáveis: Maurício Domingues Coutinho Neto e Yuri Alexandre Aoto

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 original da disciplina, seus objetivos, referências bibliográficas. Este PED, assim como as 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	Primer de algebra Linear. 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 e 7 Mc Quarrie. Ch 1 Szabo.	Aula assíncrona disponível no ou google meet no horário da disciplina. Discussões síncronas utilizando meets, google chat. Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h+2h
2	Átomos multieletrônicos I; a aproximação de Born-Oppenheimer	Átomos multieletrônicos. Hamiltoniano eletrônico. Aproximação de Hartree e produto orbital. Anti-simetria da função de onda. Spin e determinantes de Slater. Aproximação de Born-Oppenheimer: Ligações químicas em moléculas diatômicas. A molécula de H ₂ ⁺ . Ch 9 Mc Quarrie. Ch 2 Szabo. seções 2.1, 2.2, 2.3.	Aula assíncrona disponível no ou google meet no horário da disciplina. Discussões síncronas utilizando meets, google chat. Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h+2h
3	Método variacional.	Método Variacional, Exemplos para o átomo de H e He. Expansão linear, Método de Huckel e determinante secular. Ch8 Mc Quarrie;	Aula assíncrona disponível no ou google meet no horário da disciplina. Discussões síncronas utilizando meets, google chat. Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h+2h
4	Átomos multi-eletrônicos II.	Método de Hartree-Fock. Ch 9 Mc Quarrie. Ch 3 Szabo. Teorema de Koopman. Szabo 3.1 a 3.3.	Aula assíncrona disponível no ou google meet no horário da disciplina. Discussões síncronas utilizando meets, google chat. Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h+2h
5	O método LCAO. Equações de Roothaan	O método LCAO. Moléculas diatômicas. Ordem de ligação. Szabo seções 3.5 a 3.8	Aula assíncrona disponível no ou google meet no horário da disciplina. Discussões síncronas utilizando meets, google chat. Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h+2h
6	Correlação eletrônica e o método FCI	Correlação eletrônica; Interpretação física e matemática Elementos de matriz entre determinantes; Teorema de Brillouin Energia de correlação exata. Ch 2.2 e 4 de Szabo	Aula assíncrona disponível no ou google meet no horário da disciplina. Discussões síncronas utilizando meets, google chat. Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h+2h
7	Métodos de função de onda para correlação eletrônica. I	Métodos de Interação de configurações e coupled cluster Ch 4 e 5 de Szabo	Aula assíncrona disponível no ou google meet no horário da disciplina. Discussões síncronas utilizando meets, google chat.

			Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h+2h
8	Spin e Teoria de Perturbação.	Operadores de spin e suas autofunções. Funções de configuração de estado. Ch 2.5 de Szabo Teoria da perturbação: desenvolvimento. Ch 6.1 de Szabo, 8.4 de McQuarrie	Aula assíncrona disponível no ou google meet no horário da disciplina. Discussões síncronas utilizando meets, google chat. Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h+2h
9	Métodos de função de onda para correlação eletrônica. II	Teoria da perturbação para correlação eletrônica. MP2 Ch 6 de Szabo	Aula assíncrona disponível no ou google meet no horário da disciplina. Discussões síncronas utilizando meets, google chat. Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h+2h
10	Teoria do Funcional da Densidade	O Método da Teoria do Funcional da Densidade.	Aula assíncrona disponível no ou google meet no horário da disciplina. Discussões síncronas utilizando meets, google chat. Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h+2h
11	Teoria do Funcional da Densidade	O Método da Teoria do Funcional da Densidade.	Aula assíncrona disponível no ou google meet no horário da disciplina. Discussões síncronas utilizando meets, google chat. Resolução de dúvidas dos exercícios com atividade síncrona. 2h+2h
12	Apresentação de projeto	Apresentação do projeto	Apresentação do projeto

Processos de avaliação. O conceito final será baseado nas notas das atividades semanais com peso de 60% e na apresentação de um projeto final com peso de 40%.

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 as 14 horas (semanal)** de maneira síncrona.

Bibliografia

Bibliografia Básica:

- SZABO, Attila; OSTLUND, Neil S. Modern quantum chemistry: introduction to advanced electronic structure theory. New York: Dover, 1996.
- MCQUARRIE, Donald A; SIMON, John D. Physical chemistry: a molecular approach. California: University Science Books, 1997.
- P.W. Atkins, 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.