

Interações Atômicas e Moleculares - BCK0104-15 (3-0-4)-(NOTURNO) 2022-2

Michel Mendoza (michel.mendoza@ufabc.edu.br)

Sala 1027, 10mo andar, Bloco B, Sto. André.

<https://sites.google.com/site/xxmichelmendoza/>

Neste site se encontram as informações da matéria, listas, trabalhos e notas.

LINK-REUNIÃO-VIRTUAL

meet.google.com/xgj-ennt-ypu

OBJETIVO.- Discutir os conceitos fundamentais da Mecânica Quântica para entender a formação e as características básicas dos átomos, moléculas e sólidos.

EMENTA GERAL:

- 1) Introdução: Regras da disciplina. Do átomo para o sólido.
- 2) Revisão da equação de Schroendinger em 1D. Função de onda, auto-função e auto-valor. Probabilidades Quânticas. Distribuição de carga do elétron. Sistemas confinados. Cálculo das grandezas físicas.
- 3) Física atômica 1: Equação de Schroendinger em 2D e 3D. Átomo monoelétrônico: Hidrogênio. Momento angular orbital.
- 4) Transições eletrônicas. Momento angular intrínseco: Spin. Momento angular total.
- 5) Interação átomo-campo: Efeito Zeeman. Interações intra-atômicas: acoplamento spin-órbita.
- 6) Física atômica 2: Átomos multieletrônicos. Princípio de exclusão de Pauli. Notação espectroscópica.
- 7) Moléculas. Fundamentos quânticos das ligações atômicas: iônica, covalente, dipolares.
- 8) Espectros moleculares: estados rotacionais e vibracionais.
- 9) Introdução à física do estado sólido: estruturas Cristalinas, Teoria de bandas e propriedades dos materiais.

Horários das Aulas:

Turma A2

Segundas 21h-23h (Quinzenal II) e Quartas 19h-21h (Semanal), sala A-108-0

Turma B3

Segundas 19h-21h (Quinzenal II) e Quartas 21h-23h (Semanal), sala A-103-0

BIBLIOGRAFIA:

P. A. Tipler, R.A. Llewellyn, Física Moderna, Grupo Editorial Nacional (gen) -LTC (2010).

R. Eisberg et al. Física quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas. Rio de Janeiro: Câmpus, 1979.

S. Gasiorowicz, Quantum Physics. Hoboken, USA: Wiley 2003. 336

N. Ira, Quantum chemistry. 6 ed. Harlow, USA: Prentice Hall, 2008.

P. Atkins et al. Physical chemistry, 8 ed. New York: Oxford University Press, 2006.

AVALIAÇÃO:

2 Provas (P1 e P2)

P1: Quarta 06/07

P2: Quarta 17/08

Prova Substitutiva (PS): Quarta 24/08

Solicitar a PS-1 ou PS-2 (por e-mail: michel.mendoza@ufabc.edu.br), com atestado, nos dias 18 e 19 de Agosto.

Prova de Recuperação (PR, toda a matéria): Quarta 31/08

Solicitar a PR por e-mail: michel.mendoza@ufabc.edu.br [tem que ter feito as duas provas P1(ou PS-1) e P2(ou PS-2) necessariamente]. Solicitar nos dias 24,25 e 26 de Agosto.

Nota Final (NF):

$$NF=[P1(\text{ou PS})+P2(\text{ou PS})]/2$$

Nota Final com Prova de Recuperação PR:

$$NFF=(NF+PR)/2$$

CONCEITOS:

A (10.0-8.5); B (8.4-7.0); C (6.9-5.0); D (4.9-4.0); F(3.9-0.0)

***Listas de problemas:**

Lista do livro de texto básico (Tipler, cap. 7, 9 e 10), problemas marcados.

Listas gerais (Lista-geral-01 e 02).

Lista de problemas selecionados.

Todas as listas são importantes!

Cronograma de Interações Atômicas e Moleculares (2021-2)

1) Semana do 08 de Junho.

Introdução: Regras da disciplina. Do átomo para o sólido.

2) Semana do 13 de Junho

Mecânica Quântica Ondulatória I:

“Equação de Schrödinger e Aplicações Básicas”.

3) Semana do 22 de Junho

Mecânica Quântica Ondulatória II:

“Oscilador harmônico quântico”.

Átomo de Hidrogênio.

4) Semana do 27 de Junho

Spin e acoplamento spin-órbita.

Prova P1: Quarta 06/07

4) Semana do 11 de Julho

Átomos polietrônicos.

5) Semana do 20 de Julho

Ligações atômicas. Ligação Iônica. Ligação Covalente. Hibridizações.

6) Semana do 25 de Julho

Forças Intermoleculares. Transições eletrônicas.

7) Semana do 03 de Agosto

Espectroscopia Eletrônica (Espectros moleculares).

Introdução à física do estado sólido (Redes cristalinas, Ligações Metálicas, Metais, Isolantes e Semicondutores).

8) Semana do 08 de Agosto

Estrutura de bandas.

Prova P2: 17/08

Prova Substitutiva PS: Quarta 24/08

Prova de Recuperação PR: Quarta 31/08

Vídeos Aulas Sugeridas:

Procurar e assistir as vídeo-aulas (links mostrados abaixo) na semana indicada, no horário que seja melhor.

1) Semana do 13 de Junho

Mecânica Quântica Ondulatória I:

Equação de Schrödinger e Aplicações Básicas.

<https://www.youtube.com/watch?v=SWOeGsxZlfU> (48 min)

<https://www.youtube.com/watch?v=OW7iYykFYKc> (38 min)

https://www.youtube.com/watch?v=eaWyd6-n_V8 (30 min)

2) Semana do 22 de Junho

Mecânica Quântica Ondulatória II:

Oscilador harmônico quântico.

https://www.youtube.com/watch?v=52tZ8i7xI_E (36 min)

Átomo de Hidrogênio

<https://www.youtube.com/watch?v=raPJSGBWGBk> (38 min)

<https://www.youtube.com/watch?v=Zm6ruXufuX0> (40 min)

https://www.youtube.com/watch?v=Evd_wNrzL9g (62 min)

3) Semana do 27 de Junho

Acoplamento spin-órbita

<https://www.youtube.com/watch?v=S91bBWcCs30> (19 min)

<https://www.youtube.com/watch?v=jCdUkAojhMU> (17 min)

<https://www.youtube.com/watch?v=oR--fFQrL-M> (58 min)

4) Semana do 11 de Julho

Átomos polietrônicos

<https://www.youtube.com/watch?v=Kyd72rxYris> (26 min)

https://www.youtube.com/watch?v=WXri-B6o_ZA (16 min)

<https://www.youtube.com/watch?v=sabHNc54-3M> (8 min)

<https://www.youtube.com/watch?v=D8MA5KxSKms> (11 min)

<https://www.youtube.com/watch?v=Rf-DmROU-4M> (43 min)

5) Semana do 20 de Julho

Ligações atômicas

<https://www.youtube.com/watch?v=YrZKo8f0Brk> (21 min)

Ligação Iônica

<https://www.youtube.com/watch?v=guaWktUgEBg&list=PL8zzcM7NAIdjihk9J1bMxtPjOQxN-yNkW&index=14> (17 min)

Ligações Químicas

<https://www.youtube.com/watch?v=skGVNIF57ms> (18)

Teoria Estrutural - Hibridizações

<https://www.youtube.com/watch?v=GgKI98vKn4U> (37 min)

6) Semana do 25 de Julho

Forças Intermoleculares

<https://www.youtube.com/watch?v=WnMFC3aMWEA> (72 MIN)

Transições eletrônicas.

<https://www.youtube.com/watch?v=f8ApTTqVpzM> (30 min)

7) Semana do 03 de Agosto

Espectroscopia Eletrônica (Espectros moleculares)

<https://www.youtube.com/watch?v=VPBpE5t7Nlo> (50 min)

Introdução à física do estado sólido

https://www.youtube.com/watch?v=C6__2ie6PDU (10 min)

Redes cristalinas

https://www.youtube.com/watch?v=ue6T30-vh68&list=PL9UkzeO-iZtCXyFZ72YwIVnVu4Ab3T_wF (6 min)

Metais e Ligações Metálicas

<https://www.youtube.com/watch?v=ZFnEdCpEU6E> (4 min)

METAIS, ISOLANTES e SEMICONDUTORES

https://www.youtube.com/watch?v=_SvR4WcoH-Y (20 min)

8) Semana do 08 de Agosto

Estrutura de bandas

https://www.youtube.com/watch?v=kOaAKFIInNXs&list=PL9UkzeO-iZtCXyFZ72YwIVnVu4Ab3T_wF&index=5 (10 min)

Bandas de energia em cristais

<https://www.youtube.com/watch?v=pmDD2x5mGhg> (24 min)

Potencial fraco - Gap

https://www.youtube.com/watch?v=ekSCufx4zxA&list=PL9UkzeO-iZtCXyFZ72YwIVnVu4Ab3T_wF&index=6 (9 min)

Introdução - Física da Matéria Condensada

<https://www.youtube.com/watch?v=wp-ApjFQYKk> (70 min)

Importante

Sempre sera passada uma lista de assistência durante as aulas, ela servirá como referência para futuras reclamações relacionadas com as Provas P1 e P2.

Por exemplo, aluno que nunca ou muito pouco assistiu as aulas, e se saiu mau na prova, não terá direito a reclamação.

Por outro lado, durante as aulas farei algumas perguntas, alunos que contestarem corretamente ganharam um bônus, que servirá para melhorar a nota das provas.

Também, alunos que fizeram perguntas interessantes durante as aulas, ganharam também esse bônus.