

Caracterização da disciplina

Código da disciplina:	BCK0104-15	Nome da disciplina:	Interações Atômicas e Moleculares				
Créditos (T-P-I):	(3-0-4)	Carga horária:	3h	Aula prática:	x	Câmpus:	Santo André
Código da turma:	TNA3CK0104-15SA	Turma:	A3	Turno:	Noturno	Quadrimestre:	2
Docente(s) responsável(is):	João Nuno Barbosa Rodrigues						

Alocação das turmas

	Segunda	Terça	Quarta	Quinta	Sexta	Sábado
8:00 - 9:00						
9:00 - 10:00						
10:00 - 11:00						
11:00 - 12:00						
12:00 - 13:00						
13:00 - 14:00						
14:00 - 15:00						
15:00 - 16:00						
16:00 - 17:00			Atendimento ^(a)			
17:00 - 18:00						
18:00 - 19:00						
19:00 - 20:00			Aula semanal			
20:00 - 21:00						
21:00 - 22:00	Aula quinzenal					
22:00 - 23:00						

^(a) Nestes horários o atendimento será feito presencialmente em sala a definir.

Planejamento da disciplina
Objetivos gerais

Apresentar o uso da teoria quântica na compreensão das propriedades microscópicas da matéria, das forças de interação entre átomos e moléculas e das formas de estruturação da matéria, suas consequências e aplicações tecnológicas.

Objetivos específicos

Adquirir conhecimento, intuição e habilidade matemática em situações físicas envolvendo:

- 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.

Ementa

Fundamentos quânticos de ligação química; Teoria da ligação de valência; Teoria do Orbital Molecular; Interações Elétricas entre moléculas; Interações moleculares em líquidos; Introdução à física da matéria condensada: Estruturas Cristalinas, Teoria de bandas e propriedades dos materiais.

Plataforma Web

A disciplina irá ser ministrada fazendo forte uso da plataforma moodle da UFABC, acessível através do endereço moodle.ufabc.edu.br. Nesta plataforma a disciplina é identificada como “**Interações Atômicas e Moleculares - 2022.2 - João Nuno**”.

Conteúdo programático

Semana	Datas	Conteúdo	Estratégias didáticas	Avaliação
1	8/Jun	Apresentação da Disciplina (informações sobre ementa, provas, conceitos, etc.). Revisão de conceitos básicos de Física Quântica.	Aula expositiva presencial.	
2	13/Jun	Formalismo matemático da Mecânica Quântica. Comparando Mecânica Quântica e Mecânica Clássica. Introdução ao problema de uma corda vibrante clássica.	Aula expositiva presencial.	

	15/Jun	Modos de vibração de uma corda clássica. Poços de potencial um-dimensionais independentes do tempo. Poço de potencial infinito. Oscilador harmônico quântico.	Aula expositiva presencial.	
	16/Jun a 21/Jun	Lista de Exercícios #1		Questões escolha múltipla e cálculo (no Moodle)
3	22/Jun	Electrão num potencial de Coulomb e átomo de hidrogénio. Problema quântico de dois corpos. Operadores de Momento Angular.	Aula expositiva presencial.	
4	27/Jun	Harmónicos Esféricos. Equação de Schrodinger para a coordenada radial. Auto-energias do átomo de hidrogénio.	Aula expositiva presencial.	
	29/Jun	Auto-estados do átomo de hidrogénio e os orbitais atómicos. Outros átomos hidrogenóides. Falhas para átomos com vários electrões. Equação de Schrodinger para átomos polieletrónicos. Aproximação orbital.	Aula expositiva presencial.	
	30/Jun a 5/Jul	Lista de Exercícios #2		Questões escolha múltipla e cálculo (no Moodle)
5	21/Jun a 26/Jun	Número quântico de spin. Bosões e fermiões. Princípio de Pauli. Funções de onda de muitos electrões. Penetração e blindagem.	Aula expositiva presencial.	
6	11/Jul	Preenchimento de orbitais atómicos, princípio de estruturação, regra de Hund. Tabela Periódica. Espectros atómicos. Moléculas, aproximação de Born- Oppenheimer. Teoria da ligação de valência.	Aula expositiva presencial.	
	13/Jul	Simetria e intensidade de ligações moleculares. Promoção eletrónica e hibridização de orbitais atómicos. Fundamentos de Teoria do Orbital Molecular.	Aula expositiva presencial.	
	14/Jul a 19/Jul	Lista de Exercícios #3		Questões de escolha múltipla e cálculo (no Moodle)
7	20/Jul	Prova #1		Questões de cálculo, discursivas e escolha múltipla (presencial).

8	25/Jul	Orbitais moleculares ligantes e anti-ligantes. Simetria e estabilidade dos orbitais moleculares.	Aula expositiva presencial.	
	27/Jul	Moléculas com vários electrões. Moléculas diatómicas homonucleares e heteronucleares.	Aula expositiva presencial.	
	28/Jul a 2/Ago	Lista de Exercícios #4		Questões de cálculo e escolha múltipla (no Moodle).
9	3/Ago	Introdução às interações entre moléculas. Interações dipolares, ligações de hidrogénio, interações hidrofóbicas e hidrofílicas.	Aula expositiva presencial.	
10	8/Ago	Introdução aos sólidos cristalinos. Redes de Bravais, células unitárias e rede recíproca. Teoria de bandas (num sólido um-dimensional).	Aula expositiva presencial.	
	10/Ago	Níveis de energia e auto-estados de um sólido 1D periódico. Materiais condutores e isoladores. Teoria de bandas em 2D e 3D. Materiais semicondutores. Materiais supercondutores.	Aula expositiva presencial.	
	11/Ago a 16/Ago	Lista de Exercícios #5		Questões de cálculo e escolha múltipla (no Moodle).
	13/Ago	Entrega da parte escrita do Trabalho de Pesquisa Bibliográfica		Trabalho escrito.
11	17/Ago	Prova #2		Questões de cálculo, discursivas e escolha múltipla (presencial).
12	22/Ago	Apresentações dos Trabalhos de Pesquisa Bibliográfica		Apresentações orais em grupo (presenciais).
	24/Ago	Apresentações dos Trabalhos de Pesquisa Bibliográfica		Apresentações orais em grupo (presenciais).
	2022.3	Prova de Recuperação.		Questões de cálculo,

				discursivas e escolha múltipla.
Descrição dos instrumentos e estratégias didáticas para as aulas				
<p>Os <u>conteúdos teóricos</u> da disciplina serão ministrados em aulas expositivas presenciais. Ao longo da aula slides previamente semi-completos serão progressivamente preenchidos, anotados e comentados pelo professor.</p> <p>Os PDFs dos slides anotados das aulas serão disponibilizados na página Moodle da disciplina.</p> <p>Serão disponibilizadas 7 vídeo-aulas de resolução de exercícios (gravadas em quadrimestres anteriores), assim como as vídeo-aulas de exposição teórica desses quadrimestres. Estes vídeos serão disponibilizados na página Moodle da disciplina.</p>				
Descrição dos instrumentos para o atendimento aos alunos				
<p>Semanalmente teremos um horário de atendimento para a turma A3 (quartas-feiras das 16h-17h) e outro para a turma B4 (quartas-feiras das 17h-18h).</p> <p>Os alunos podem comparecer aos horários de atendimento de qualquer uma das duas turmas. No entanto se houver muitos alunos num dado horário, terão prioridade os alunos da turma a ser atendida naquele horário.</p> <p>Os alunos poderão também colocar dúvidas por e-mail ou chat do moodle fora destes horários. No entanto, em tais casos o retorno poderá demorar um pouco mais.</p> <p>Em caso de necessidade, poderemos combinar horários de atendimento extraordinários tanto presenciais como remotos.</p>				
Descrição dos instrumentos e critérios de avaliação qualitativa				
Conceito Final				
<p>A nota final (NF) será dada por</p> $NF = 0.30 * P1 + 0.35 * P2 + 0.20 * TPB + 0.15 * EX$ <p>onde</p> <p>P1 = Prova #1 (dissertativa, cálculo e escolhas múltiplas). P2 = Prova #2 (dissertativa, cálculo e escolhas múltiplas). TPB = Trabalho de Pesquisa Bibliográfica (trabalho escrito + apresentação oral). EX = Listas de Exercícios Online (cálculo e escolhas múltiplas).</p> <p>O conceito final (CF) é obtido da seguinte forma:</p>				

Nota Final	Conceito Final
$8,5 \leq NF$	A
$7,0 \leq NF < 8,5$	B
$5,0 \leq NF < 7,0$	C
$4,0 \leq NF < 5,0$	D
$NF < 4,0$	F

Formato dos componentes da avaliação

Listas de Exercícios (EX):

- Com questões de cálculo e escolhas múltiplas.
- Teremos 5 listas realizadas quinzenalmente na página Moodle da disciplina (entre as 9h00 de quinta-feira e as 21h00 de terça-feira).
- Só as quatro melhores listas de cada aluno contarão para a nota.
- As Listas realizar-se-ão nas seguintes datas: Lista #1 entre **16-21/Junho**; Lista #2 entre **30/Junho-5/Julho**; Lista #3 entre **14-19/Julho**; Lista #4 entre **28/Julho-2/Agosto**; Lista #5 entre **11-16/Agosto**.

Provas (P1 e P2):

- Com questões dissertativas, de cálculo e escolha múltipla.
- Realizadas presencialmente.
- O P1 cobrirá a primeira parte da matéria e será realizada no horário da aula de **20/Julho**.
- O P2 cobrirá toda a matéria, com mais enfoque na segunda parte da matéria. Será realizada no horário da aula de **17/Agosto**.

Trabalho de Pesquisa Bibliográfica (TPB):

- Trabalho de pesquisa bibliográfica feito em grupos de 4 a 5 alunos.
- Cada grupo terá que:
 1. Entregar um trabalho escrito com um máximo de quatro páginas (duas colunas, fonte 12, Arial), incluindo título, figuras e referências bibliográficas.
 2. Fazer uma apresentação presencial de 9 minutos (tolerância de +/- 30 segundos) com mais 3 minutos de perguntas da audiência.
- Cada aluno terá ainda que:
 1. Avaliar um trabalho de outro grupo.
 2. Classificar duas avaliações de trabalhos feitas por outros alunos.
- A parte escrita valerá 40% da nota do trabalho, valendo a apresentação outros 40%. As avaliações (do trabalho de outro grupo e das avaliações de outros alunos) valerá 20%.
- Os temas sugeridos serão disponibilizados pelo professor **até ao dia 30/Junho**.
- Cada grupo deverá comunicar o tema que escolheu **até ao dia 7/Julho**.
- A data limite para entrega do trabalho escrito é o **dia 13/Agosto**.
- As apresentações serão realizadas na última semana de aulas (em **22 e 24/Agosto**).

Prova de Recuperação

A prova de recuperação (REC) terá lugar no início do próximo quadrimestre em data a definir. Ela cobrirá todo o conteúdo da disciplina. Esta poderá ser feita pelos alunos que obtiverem conceitos D e F. O conceito final (CFrec), neste caso, será dado pela fórmula:

$$CFrec = 0.5*CF + 0.5*REC$$

Critérios de Presença

Como critério de presença mínima, é exigido que o aluno realize 60% das avaliações. Não é exigida a frequência das aulas presenciais.

Código de Conduta Acadêmica e Regras do Curso

Todos os alunos do curso devem ter ciência do código de conduta acadêmica: em caso de plágio, cola, ou outra violação das normas acadêmicas **em qualquer atividade do curso**, os alunos envolvidos receberão o conceito **F** no curso. Os alunos podem, e devem, se ajudar nos estudos e nas listas (tirando dúvidas e ou trabalhando em grupo), no entanto as avaliações devem ser realizadas individualmente.

As **Listas de Exercícios** podem ser discutidas em grupo. Contudo o uso de planilhas compartilhadas com as soluções, a cópia de respostas de colegas ou a realização das provas por terceiros é expressamente proibido, sendo uma violação grave das normas do curso.

As **Provas** deverão ser realizadas individualmente.

O **Trabalho de Pesquisa Bibliográfica** pressupõe a colecta de informações em fontes bibliográficas diversas (livros, artigos, websites, etc.) pelo grupo de alunos. As informações colectadas devem ser claramente referenciadas. Aspas devem ser usadas sempre que se extrair texto *ipsis verbis* de alguma fonte (sendo essa fonte claramente identificada). A cópia de outros trabalhos, ou a realização deste por terceiros é expressamente proibido, sendo uma violação grave das normas do curso.

Referências bibliográficas básicas

1. TIPLER, Paul A.; LLEWELLYN, Ralph A, Física Moderna. 3 ed. : LTC, 2006.
2. ATKINS, Peter, Físico Química. 7ª ed. : LTC, 2002. vols. 1 e 2.
3. SHRIVER, D. F; ATKINS, P. W. Química Inorgânica .3 ed. : Bookman, 2003.

Referências bibliográficas complementares

1. BALL, David W. Físico Química, : Thomson, 2005. v. 1 e 2.
2. LEVINE, Ira N. Quantum chemistry. 6th ed. : Prentice Hall, 2008.
3. LEE, J D. Química inorgânica não tão concisa. : Edgard Blucher, 1999.
4. MOORE, Walter John. Físico química. Edgard Blucher, 1976.
5. MCQUARRIE, Donald A; SIMON, John D. Physical chemistry: a molecular approach. University Science Books, 1997.
6. KITTEL, Charles. Introdução à Física do Estado Sólido, 8ª Edição, LTC, 2006.

Outras referências e materiais de suporte

Além dos livros-texto base e dos complementares (listados acima), serão também disponibilizados materiais extras (slides anotados das aulas, folhas de exercícios e suas resoluções, correções das listas de exercícios online, vídeo-aulas e notas de outros professores, links para textos disponíveis na web).