

Caracterização da disciplina

Código da disciplina:	BCK0104	Nome da disciplina:	Interações Atômicas e Moleculares						
Créditos (T-P-I):	(3-0-4)	Carga horária:	3 horas	Aula prática:	0	Câmpus:	SA		
Código das turmas:	DB1BCK0104-15SA DA1BCK0104-15SA	Turmas:	A1, B1	Turno:	D	Quadrimestre:	QS2	Ano:	2022
Docente responsável:	Herculano da Silva Martinho								

Alocação da turma

	Segunda	Terça	Quarta	Quinta	Sexta	Sábado
8:00 - 9:00	B1 quinzenal II		A1 semanal			
9:00 - 10:00						
10:00 - 11:00	A1 quinzenal II		B1 semanal			
11:00 - 12:00						
12:00 - 13:00						
13:00 - 14:00						
14:00 - 15:00						
15:00 - 16:00						
16:00 - 17:00						
17:00 - 18:00						
18:00 - 19:00						
19:00 - 20:00						
20:00 - 21:00						
21:00 - 22:00						
22:00 - 23:00						

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.

Conteúdo programático / Cronograma

Dia	Temas	Estratégias didáticas	Avaliação
08/06	Apresentação da Disciplina. Mecânica quântica. Revisão de conceitos fundamentais. Equação de Schroedinger. Equação de Schroedinger independente do tempo em 3D. Coordenadas esféricas. Soluções. Autovalores, Números	Aula presencial, com suporte de material adicional via plataforma SIGAA.	PROVA 1

	quânticos e degenerescência. Autofunções. (Aula 1)		
13/06	Aula de exercícios		
15/06	Átomos de um elétron I. Densidades de Probabilidade. Momento angular orbital. Equações de Autovalores. (Aula 2)		
22/06	Átomos de um elétron II. O átomo de hidrogênio. (Aula 3)		
27/06	Aula de exercícios		
29/06	Momentos de dipolo magnético, spin e taxas de transição. Experimento de Stern-Gerlach. Spin do elétron. Interação spin-orbita e níveis de energia do hidrogênio. Taxas de transição e regras de seleção. (Aula 4) Prova 1 (online, sistema SIGAA, à partir 10 hs).		
06/07	Átomos multieletrônicos I. Partículas idênticas. Princípio de Exclusão. Forças de troca e o átomo de Hélio. Magnetismo (Aula 5)		
11/07	Aula de Exercícios		
13/07	Átomos multieletrônicos II. Teoria de Hartree. Resultados da teoria de Hartree. (Aula 6)		PROVA 2
20/07	Átomos multieletrônicos III. Estados fundamentais de átomos. Teorias do orbital de valência e de valencia. (Aula 7)		
25/07	Aula de Exercícios		
27/07	Prova 2, presencial		
03/08	Interações moleculares. Propriedades elétricas da matéria. Polarizabilidade. Interações dipolares. Ligações de hidrogênio. (Aula 8)		
08/08	Estruturas cristalinas e sólidos I. Arranjos periódico de átomos. Base e estrutura cristalina. Redes cristalinas. (Aula 9)		
10/08	Estruturas cristalinas e sólidos II. Estruturas cristalográficas simples. Visualização de estrutura atômica. (Aula 9)		PROVA 3
17/08	Matéria mole I. Introdução à matéria mole. Gases líquidos e sólidos. Condensação e congelamento. Comportamento viscoso, elástico e viscoelástico. Líquidos e vidros. (Aula 10)		
22/08	Aula de Exercícios		
24/08	Prova 3, presencial		
29/08	Prova Substitutiva/Recuperação, presencial		
31/08	Divulgação dos conceitos finais		

Descrição dos instrumentos e critérios de avaliação qualitativa

Utilizaremos as plataformas SIG e Google Classrom como ferramentas web para apoio ao curso. Na plataforma SIG será disponibilizado material didático específico (listas de exercícios, vídeo aulas selecionadas assíncronas). Uma prova também serão realizadas neste ambiente. As aulas síncronas e plantões de dúvidas acontecerão na plataforma Google Classroom. Todas as aulas e encontros síncronos serão gravados e disponibilizados nos ambientes virtuais (SIG e Google Classroom).

Avaliações

A avaliação do conteúdo será realizada através da realização de 3 provas ao longo do quadrimestre, nos dias elencados no cronograma. A prova 1 será aplicada no ambiente SIG. As demais serão presenciais. A Prova 1 será constituída por questões de múltipla escolha escolhidas aleatoriamente dentro de um banco de questões. As demais provas serão dissertativas. A duração das provas será de 2 (duas) horas.

A nota será calculada através da expressão: $N = (Prova\ 1 + Prova\ 2 + Prova\ 3)/3$

Os conceitos serão dados pela tabela,

- A: $N > 8,5$
- B: $7,0 < N < 8,5$
- C: $5,5 < N < 7,0$
- D: $4,0 < N < 5,5$
- F: $N < 4,0$

Haverá ainda uma prova de recuperação (REC), que também servirá como substitutiva, para àqueles que não puderam realizar alguma prova por motivo justificado, dentro dos critérios preconizados pela legislação vigente. Esta prova cobrirá todo o conteúdo da disciplina. Poderão fazer a prova de recuperação os estudantes que obtiveram conceito final D ou F, além daqueles que estudantes elegíveis para a prova substitutiva.

Após a prova de recuperação a nota final será: $NF = (N+REC)/2$.

Referências bibliográficas básicas

1. EISBERG, Robert; RESNICK, Robert. Física quântica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos e partículas. Tradução de Paula Costa Ribeiro, Enio Frota da Silveira, Marta Feijó Barroso. Coordenação de Carlos Maurício Chaves. Rio de Janeiro, RJ: Elsevier, c1979.
2. ATKINS, Peter. Físico-química. 7ª ed. Rio de Janeiro: LTC, 2002. vols 1 e 2.
3. TIPLER, Paul A.; LLEWELLYN, Ralph A.. Física moderna. 3 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2006

Referências bibliográficas complementares

1. KITTEL, Charles. Introdução à física do estado sólido. Tradução de Ronaldo Sérgio de Biasi. 8. ed. Rio de Janeiro, RJ: LTC, 2006.
2. JONES, Richard A. L. Soft condensed matter. Oxford: Oxford University, c2002. x, (Oxford master series in condensed matter physics).
3. CALLISTER, William D.; RETHWISCH, David G. Ciência e engenharia de materiais: uma introdução. Tradução de Sérgio Murilo Stamile Soares. Revisão de José Roberto Moraes D'Almeida. 8. ed. Rio de Janeiro, RJ: LTC, c2012.