



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre 2022

Disciplina	
Código	Nome
QF535	Introdução à Química Quântica

Turmas	Horário	Local
A	Segunda-feira 21h às 23h	IQ06
A	Quarta-feira 19h às 21h	IQ06

Docentes

Rogério Custodio, rogerct@unicamp.br, sala H-318

Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações

Descrição: A disciplina será ministrada com aulas pelo docente com parte do histórico do desenvolvimento das ideias que levaram a formulação da teoria quântica. A abordagem deve privilegiar aspectos que possam ser compreendidos em nível secundário/colegial. Temas específicos que complementem o desenvolvimento das aulas serão atribuídos aos alunos na forma de seminários em grupo. Os seminários devem sempre contextualizar o desenvolvimento das ideias e explorar o ambiente histórico em que foram desenvolvidos. A organização dos grupos fica a critério dos próprios alunos. O docente deve indicar apenas o número máximo de alunos por grupo. Os alunos apresentarão os temas em aula e serão questionados sobre os mesmos, quando se dará uma discussão mais ampla sobre cada tópico. Juntamente com a apresentação, deverá ser entregue um resumo de uma página com os aspectos principais abordados nos seminários. O resumo do seminário deverá ser entregue apenas pelo grupo que apresentou o seminário. Ao final do semestre será realizada uma única prova sobre todo o conteúdo da disciplina.

Prazos de Entrega das Atividades e dos Resultados das Avaliações

Descrição: Os seminários dos grupos de alunos serão atribuídos na primeira semana de aula. O resumo do seminário poderá ser entregue até uma semana após a apresentação. A apresentação dos seminários deve ter duração de pelo menos 1h. As datas da apresentação dos seminários serão estabelecidas, mas poderão sofrer algum adiamento dependendo do desenvolvimento das aulas apresentadas pelo professor.

Critérios de Avaliação e Aprovação

Descrição detalhada do método para o cálculo da média parcial e da nota final (que combine a média parcial e nota do exame)

- 1) Será realizada uma (1) prova no final do semestre letivo.
- 2) Todos os alunos apresentarão seminários em grupo, dependendo do número de alunos matriculados. Os seminários receberão nota que comporão a média da disciplina. Nos seminários deverão ser explorados aspectos históricos, didáticos e conceituais contextualizando o tema a ser apresentado.
- 3) Súmulas dos temas a serem apresentados nos seminários devem ser disponibilizados até uma semana após a apresentação. Este conteúdo será acessado por todos os alunos da turma e disponibilizado pelo docente responsável.

A média M será determinada por: $M = 0,5 * P1 + 0,4 * S1 + 0,1 * R1$, sendo P1 a nota da prova, S1 a nota ou média simples do(s) seminário(s) e R1 a nota ou média simples do(s) resumo(s). Média maior ou igual a cinco (5) o aluno está aprovado. Média menor do que cinco (5) o aluno fará exame. A média final (MF), em caso de exame, será a média simples entre a média atingida durante o semestre e a nota do exame (Ex), ou seja: $MF = (M + Ex) / 2$. Média final maior ou igual a cinco (5) o aluno está aprovado. Considerando que os seminários são ministrados por grupos de alunos, a nota de cada seminário será atribuída ao grupo.

Forma de Atendimento Extra-Classe

Descrição: Disponibilidade de atendimento em qualquer horário por e-mail ou agendamento de horário para esclarecimentos presencialmente ou online através do Google Classroom. Não há restrição de horário de atendimento, exceto em caso em que houver sobreposição de horário com outras atividades de caráter institucional do docente. Em resumo, possibilidade de atendimento em quase qualquer horário ou dia da semana.

Calendário

Data	Atividade
03/10/2022	Seminário + discussão
05/10/2022	Seminário + discussão
10/10/2022	Seminário + discussão
17/10/2022	Seminário + discussão
19/10/2022	Seminário + discussão
24/10/2022	Seminário + discussão
10/11/2022	Seminário + discussão
17/11/2022	Seminário + discussão
22/11/2022	Seminário + discussão
24/11/2022	Seminário + discussão
29/11/2022	Seminário + discussão
01/12/2022	Seminário + discussão
06/12/2022	Prova
15/12/2022	Exame

A prova será ministrada no dia 06 de dezembro de 2021.

O exame será agendado para o dia 15 de dezembro de 2021.

A partir do dia 03/10 serão realizados seminários com duração mínima de uma hora por alunos matriculados nas disciplinas, seguido por discussão e complementação do tópico apresentado pelo professor. As datas planejadas para os seminários serão: 03/10, 05/10, 10/10, 17/10, 19/10, 24/10, 10/11, 17/11, 22/11, 24/11, 29/11 e 01/12/2021. Alunos que tiverem impossibilidade de apresentação do seminário deverão substituir a apresentação por um texto completo sobre os aspectos que seriam discutidos em sua apresentação.

22 a 27/08 - Semana da Química - não haverá aula para as disciplinas dos cursos 05/50.

07/09 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

12/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

18/10 - Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula

28 e 29/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

02/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

14 e 15/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

08 a 10/12 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades

08 a 14/12 - Semana de Estudos

15 a 21/12 - Semana de Exames

Outras informações relevantes

O conteúdo da disciplina será dividido em cinco partes de acordo com o programa vigente. Todo material apresentado (slides, resumos dos seminários, programa da disciplina e outros dados) será disponibilizado no Google à medida que o conteúdo for ministrado.

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA



Disciplina	
Código	Nome
QF535	Introdução à Química Quântica

Vetor
OF:S-2 T:004 P:000 L:000 O:002 D:000 HS:006 SL:004 C:006 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req	F 328
---------	-------

Ementa
Evolução histórica da descrição da luz e da matéria. A antiga mecânica quântica, quantização da energia da radiação e mecânica. Os postulados da mecânica quântica ondulatória. Aplicações a sistemas simples. Química quântica: estruturas atômicas e estruturas moleculares de sistemas simples. Ensino de química quântica: atividades orientadas.

Programa
I. Aspectos históricos da física, descrição da luz e da estrutura da matéria anteriores à antiga física quântica. A evolução da teoria é conduzida pela evolução experimental. Alguns experimentos que as teorias não puderam modelar.
II. As fundações da antiga mecânica quântica, Planck, Einstein: a nova descrição da radiação eletromagnética; Bohr: a quantização da energia mecânica, estados estacionários, transições radiativas, um modelo quântico para o átomo de H Falhas, fraquezas e tentativas de correção do modelo de Bohr.
III. As fundações da moderna química quântica, De Broglie: dualidade, ondas de matéria e os experimentos que as detectaram; Heisenberg e a mecânica matricial; A mecânica ondulatória de Schroedinger; A existência do spin do elétron e sua ausência na teoria de Schroedinger; Dirac: a linearização da equação de onda, previsão e descoberta das antipartículas;
IV. Os postulados da mecânica quântica não relativística, Aplicações a sistemas simples uni e bidimensionais; O átomo de H segundo Schroedinger; Átomos multieletrônicos; Princípio de Exclusão de Pauli e suas consequências; Os primeiros trinta anos da mecânica quântica, uma visão integrada
V. Química Quântica – Os limites práticos da teoria e métodos para contorna-los; Hartree e a aproximação das partículas independentes; Fock: férmions e os átomos multieletrônicos; Correlação eletrônica; A molécula H_2^+ e a natureza da ligação química; Moléculas diatômicas e poliatômicas: o método CLAO; A química quântica ensinada no colégio: Estruturas de Lewis e seu contexto histórico. Pauling, hibridização e diagrama de ocupação orbital. Teoria da ligação de valência.

VI. Atividades Orientadas: O ensino da química quântica no colégio.

Bibliografia

1. D.A.McQuarrie and J.D.Simon, Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books; 1a. Edição (1997).
2. Sebera, D.K., Estrutura Eletrônica e Ligação Química, Ed. Polígono, 1a Edição(1968)
3. Giberti, A., Origens históricas da física moderna, Fundação Calouste Goulbekian, 1a Edição (1982)
4. Gamow, G., Thirty Years that Shook Physics: The Story of Quantum Theory, Dover, Reprint, (1985)
5. Hoffman, B.,The Strange Story of the Quantum, Dover, Reprint, (1985),

Crerérios de Avaliaçãõ

Crerérios de avaliaçãõ definidos pelo Professor, com base no disposto na Seçãõ I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliaçãõ do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduaçãõ. Frequência: 75 % (* O abono de faltas serã considerado dentro do previsto no capítulo VI, seçãõ X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduaçãõ)