



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre 2023

| Disciplina | |
|-------------------|-------------------------------|
| Código | Nome |
| QF535 | Introdução à Química Quântica |

| Turmas | Horário | Local |
|---------------|-------------------------|--------------|
| A | Terça-feira 21h às 23h | CB16 |
| A | Quarta-feira 19h às 21h | CB16 |

| 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. Os resultados das avaliações serão disponibilizados em até 10 dias úteis. |

| 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) |
| <ol style="list-style-type: none">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: $M = 0,5 \cdot P1 + 0,4 \cdot S1 + 0,1 \cdot R1$, 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. Não será imposta uma média parcial mínima para a realização de Exame. Todos os alunos terão direito de realizar o exame, caso não tenham atingido nota suficiente para aprovação. Os alunos devem apresentar uma frequência mínima de 75% nas aulas, como parte do critério de aprovação, satisfazendo o artigo 56 do Regimento Geral da Graduação. O exame será utilizado como prova substitutiva em caso de necessidade de acordo com a **Deliberação CG 2022/01** sobre **PROVA SUBSTITUTIVA EM CASO DE FALTA JUSTIFICADA POR COVID-19**.

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 |
|------------|--------------------------------|
| 01/08/2023 | Início das aulas da disciplina |
| 05/09/2023 | Seminário + discussão |
| 06/09/2023 | Seminário + discussão |
| 12/09/2023 | Seminário + discussão |
| 13/09/2023 | Seminário + discussão |
| 19/09/2023 | Seminário + discussão |
| 20/09/2023 | Seminário + discussão |
| 18/10/2023 | Seminário + discussão |
| 24/10/2023 | Seminário + discussão |
| 25/10/2023 | Seminário + discussão |
| 31/10/2023 | Seminário + discussão |
| 01/11/2023 | Seminário + discussão |
| 07/11/2023 | Seminário + discussão |
| 29/11/2023 | Prova |
| 12/12/2023 | Exame |

A prova será ministrada no dia 29 de novembro de 2023.

O exame será agendado para o dia 12 de dezembro de 2023.

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: 05/09, 06/09, 12/09, 13/09, 19/09, 20/09, 18/10, 24/10, 25/10, 31/10, 01/11 e, 07/11/2023. 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.

21 a 25/08 - Semana da Química - não haverá aula para as disciplinas dos cursos 05/50.

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

12 a 14/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
17/10 - Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula
28/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
02 a 04/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
15/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
20/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
08 e 09/12 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades
04 a 09/12 - Semana de Estudos
11 a 16/12 - Semana de Exames

Outras informações relevantes

(1) Art. 56 do Regimento Geral de Graduação: São condições para aprovação: II - nas disciplinas em que nota e frequência são adotadas como forma de avaliação – obter **nota final** igual ou superior a 5,0 (cinco vírgula zero) e a frequência mínima estabelecida para a disciplina no Catálogo dos Cursos de Graduação; a frequência mínima de 75%.

(2) **Sobre o Abono de Faltas:** os critérios do Abono de Faltas são definidos pelo artigo 72, do Regimento Geral de Graduação.

(3) De acordo com a **Deliberação CG 2022/01** sobre **PROVA SUBSTITUTIVA EM CASO DE FALTA JUSTIFICADA POR COVID-19**, a CG estabelece que o exame final poderá substituir a avaliação no dia de faltas abonadas pelo inciso V do artigo 72, exceto se o(a) estudante comprovar que a ausência foi motivada por suspeita ou contágio por COVID-19. Nessas situações – suspeita ou contágio comprovado por COVID-19 – o(a) estudante terá direito a reposição da atividade avaliativa, desde que componha sua média final, em data a ser combinada com o docente responsável, não podendo a prova de exame final ser utilizada para fins de substituição.

(4) Quaisquer alterações no PDE, propostas pelo(a) Docente ou Discentes, no transcorrer do semestre, só poderão ser realizadas mediante a concordância do(a) Docente e Discentes, e autorização da Comissão de Graduação.

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

| | | | | | | | | |
|---|---|---|----------|----|----|----------|-----------|----------|
| Código: QF535 | | | | | | | | |
| Nome: Introdução à Química Quântica | | | | | | | | |
| Nome em Inglês: Introduction to Quantum Chemistry | | | | | | | | |
| Nome em Espanhol: Introducción a la Química Cuántica | | | | | | | | |
| Tipo de Disciplina: Semanal | | | | | | | | |
| Tipo de Aprovação: Nota e Frequência | | | | | | | | |
| Característica: Regular | | | | | | | | |
| Frequência: 75% | | | | | | | | |
| Tipo de Período / Período de Oferecimento: Semestral / 2º Período - períodos pares | | | | | | | | |
| Exige Exame: Sim | | | | | | | | |
| Vetores | | | | | | | | |
| T | L | P | O | PE | OE | SL | SEMANAS | CRÉDITO |
| 4 | - | - | 2 | - | - | 4 | 15 | 6 |
| Ocorrência nos Currículos: 05, 56 | | | | | | | | |
| Pré-requisitos: 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: | | | | | | | | |
| <p>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.</p> <p>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</p> <p>Falhas, fraquezas e tentativas de correção do modelo de Bohr.</p> <p>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;</p> <p>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.</p> <p>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 H₂⁺ 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.</p> <p>VI. Atividades Orientadas: O ensino da química quântica no colégio.</p> | | | | | | | | |

Bibliografia Básica

- 1) MCQUARRIE, D. A.; SIMON, J. D.; **Physical Chemistry: A Molecular Approach**; University Science Books, New York (1997).
- 2) LEVINE, I. N.; **Physical Chemistry**; McGraw Hill, New York, 6a ed. (2008)
- 3) MARTINS, R. A.; ROSA, P. S.; **História da Teoria Quântica**; Editora Livraria da Física, São Paulo (2014).

Bibliografia Complementar

- 1) GIBERTI, A.; **Origens Históricas da Física Moderna**, Fundação Calouste Goulbekian, São Paulo (1982)
- 2) GAMOW, G.; **Thirty Years that Shook Physics: The Story of Quantum Theory**, Dover, New York (1985)
- 3) HOFFMAN, B.; **The Strange Story of the Quantum**, Dover, New York (1985),
- 4) FEYNMAN, R.; **A Estranha Teoria da Luz e da Matéria**, Editora Senai, São Paulo (2018).
- 5) PIZA, A. F. R. T.; **Schrödinger & Heisenberg: A Física Além do Senso Comum**; Odysseus Ed., 2ª ed., São Paulo (2007).
- 6) VALADARES, E. C. **Newton, A Órbita da Terra em um Copo D'água**; Odysseus Ed., São Paulo (2007).
- 7) GAVROGLU, K.; SIMÕES, A.; **Neither Physics Nor Chemistry: A History of Quantum Chemistry**, MIT Press, New York (2011).