
Intro. Física Atômica e Molecular

4300315 2a-f, 19 – 21h, 4a-f, 21-23h

Sala 208 Ala Central

Prof. Luis Gregório Dias da Silva

Depto. Física Materiais e Mecânica – IF – USP

Ed. Alessandro Volta, bloco C, sala 214

luisdias@if.usp.br

Página do curso ([Stoa -> Cursos -> IF -> 430 -> 4300315](#))

<http://disciplinas.stoa.usp.br/course/view.php?id=5622>

Avisos via Twitter: <https://twitter.com/ProfLuisDias>

O que será abordado neste curso:

Parte 1 – Física Atômica (8 aulas)

- Revisão de Mecânica Quântica
- Átomo de Hidrogênio, Átomo de Hélio, átomos polieletrônicos.
- Acoplamento spin-órbita, efeito Stark, efeito Zeeman.

Parte 2 – Física Molecular: vibrações e rotações (7 aulas)

- Aproximação de Born-Oppenheimer
- Teoria do Orbital Molecular, aproximação de Hückel.
- Espectro vibracional de moléculas diatômicas e poliatômicas

Parte 3 – Estrutura eletrônica em moléculas e sólidos (10 aulas).

- Métodos de tight-binding, Hartree-Fock e C.I.
 - Teoria do Funcional Densidade.
 - Aplicações: moléculas e sólidos (grafeno).
-

Bibliografia:

- Notas de aula do professor – em pdf (PowerPoint das aulas)

Disponíveis no site da disciplina.

- *Molecular Quantum Mechanics*, P. W. Atkins e R. S. Friedman, 4a edição, Oxford University Press.

Partes 1 e 2 e o início da Parte 3 essencialmente seguirão este livro.

- *Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos*, J.D.M. Vianna, A. Fazzio, S. Canuto,

Texto complementar importante, particularmente na parte 3 do curso.

Avaliação (regras do jogo):

- Critério de Avaliação: Serão três avaliações (em sala) nas datas indicadas:
 - P_1 : 25 de março – P_2 : 6 de maio – P_3 : 24 de junho.
- Haverá também **atividades feitas em sala**, valendo 3% da nota final:

$$N_A = 0.97 \frac{(P_1 + P_2 + P_3)}{3} + 0.03A$$

P_1, P_2, P_3 : Provas
A: Média das atividades
 N_p : Nota das avaliações.
 N_F : Nota FINAL do curso.

- Se $N_A \geq 5.0$ (e frequência mínima 70%) → $N_F = N_A$ **Aprovado** 😊
- Se $3.0 \leq N_A < 5.0$ → Recuperação (N_R) em data a ser confirmada.
$$N_F = (N_A + N_R) / 2$$
- Se $N_A < 3.0$ → $N_F = N_A$ **Reprovado** ☹️
- Obs: Haverá uma **Prova Substitutiva** (“aberta”) no dia 1/07.
- A nota da SUB **obrigatoriamente** substitui a menor nota das provas.

Calendário (sujeito a alteração):

2015 – 1º sem - CALENDARIO Física Atômica e Molecular - 4300315								
	Dom	Seg	Ter	Qua	Qui	Sex	Sab	atividade
fevereiro	23	24	25	26	27	28	29	Aula 1 (24/02): Apresentação do Curso; Revisão de Mecânica Quântica Aula 2: Momento Angular; partícula em um anel quântico.
	1	2	3	4	5	6	7	Aula 3: Teoria de Perturbação em Mecânica Quântica. Aula 4: Atomo de Hidrogênio, átomos hidrogenóides
março	8	9	10	11	12	13	14	Aula 5: Atomo de Hélio: o problema de dois elétrons. Aula 6: Átomos polieletrônicos: o problema de muitos corpos.
	15	16	17	18	19	20	21	Aula 7: Regras de Hund; acoplamento spin-órbita Aula 8: Efeito Stark e Efeito Zeeman.
	22	23	24	25	26	27	28	23/03: Revisão e exercícios 25/03: P1
	29	30	31	1	2	3	4	30/mar a 3/ abr Semana Santa
abril	5	6	7	8	9	10	11	Aula 9: Aproximação de Born-Oppenheimer Aula 10: Teoria do Orbital molecular: Moléculas Diatômicas
	12	13	14	15	16	17	18	Aula 11: Moléculas diatômicas: espectro rotacional e Regras de seleção. Aula 12: Moléculas diatômicas: espectro vibracional
	19	20	21	22	23	24	25	20-21/abr - Recesso+Tiradentes Aula 13: Moléculas diatômicas: transições vibrônicas: Franck-Condon
	26	27	28	29	30	1	2	Aula 14: Teoria do Orbital Molecular de Moléculas Poliatômicas; Huckel Aula 15: Moléculas poliatômicas: espectro vibracional, inversion doubling
	3	4	5	6	7	8	9	4/05: Revisão P2 - Exercícios 6/05: P2
maio	10	11	12	13	14	15	16	Aula 16: Método de tight binding e aplicações em sólidos Aula 17: Aplicações: estrutura eletrônica do grafeno.
	17	18	19	20	21	22	23	Aula 18: Estrutura eletrônica: Método de Hartree-Fock. Aula 19: Estrutura eletrônica: Correlações de elétrons, método CI
	24	25	26	27	28	29	30	ENFMC: Não haverá aulas desta disciplina
	31	1	2	3	4	5	6	Aula 20: Estrutura eletrônica: Teoria do Funcional Densidade Aula 21: Estrutura eletrônica: Teoria do Funcional Densidade II
junho	7	8	9	10	11	12	13	Aula 22: Métodos semi-empíricos Aula 23: Aplicações: estrutura eletrônica de moléculas.
	14	15	16	17	18	19	20	Aula 24: Aplicações: outros exemplos. Aula 25: Aplicações: outros exemplos.
	21	22	23	24	25	26	27	22/06: Revisão P3 - Exercícios 24/06: P3
	28	29	30	1	2	3	4	1/07: SUB
	Dom	Seg	Ter	Qua	Qui	Sex	Sab	

Aulas: segunda-feira, 19h-21h; quarta-feira 21h-23h