

QFL-1242, FÍSICO-QUÍMICA II

QUÍMICA QUÂNTICA

2º Semestre – 2023

Prof. Dr. Mauro C. C. Ribeiro

Laboratório de Espectroscopia Molecular, B4 Térreo

Horário: segunda e quinta-feira, 08:00 – 09:40 h. Sala 774, bloco 7.

Monitor: Daniel Arley S. Oliveira (danielarley452@usp.br)

CRONOGRAMA

| | |
|-----------------|---|
| Agosto | Dualidade onda-partícula. Espectro atômico do hidrogênio. Equação de Schrödinger. |
| Setembro | Formalismo da Mecânica Quântica. Partícula na caixa. 21/Setembro: Prova 1. |
| Outubro | Oscilador harmônico. Espectroscopia vibracional. Rotor rígido. Espectroscopia rotacional. Vibrações de moléculas poliatômicas. Átomo de hidrogênio. 30/Outubro: Prova 2. |
| Novembro | Partículas idênticas. Spin. Átomos polieletrônicos. Orbitais moleculares. Moléculas diatômicas. |
| Dezembro | Moléculas poliatômicas. Química Quântica computacional. 11/Dezembro: Prova 3. |

Avaliação: Nota final = $(P1 + P2 + P3) / 3$

Os alunos que faltarem em alguma prova por motivo justificado poderão fazer uma prova substitutiva no dia 18/12/2023.

Bibliografia

1. R. Eisberg, R. Resnick, *Física Quântica*, Ed. Campus, 8ª ed., 1979.
2. P. W. Atkins, *Físico-Química*, LTC, 9ª ed., 2012.
3. D. McQuarrie, J. D. Simon, *Physical Chemistry*, Univ. Sc. Books, 1997.
4. I. N. Levine, *Physical Chemistry*, McGraw-Hill, 6ª ed., 2009.
5. R. S. Berry, S. A. Rice, J. Ross, *Physical Chemistry*, Oxford, 2ª ed., 2000.
6. David W. Ball, *Físico-Química*, Thomson, vols. 1 e 2, 2005.
7. F. L. Pilar, *Elementary Quantum Chemistry*, McGraw-Hill, 2ª ed., 1990.
8. I. N. Levine, *Quantum Chemistry*, Prentice Hall, 5ª ed., 2000.
9. R. P. Feynman, R. B. Leighton, *The Feynman Lectures on Physics, Quantum Mechanics*, Vol. III, Addison-Wesley Pub. Co., 1965.
10. L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond*, Cornell Univ. Press, 2ª ed., 1944.