



**UNIVERSIDAD DE CHILE  
FACULTAD DE CIENCIAS**

**NOMBRE DEL CURSO: Físicoquímica Molecular**

**Semestre y año: Segundo Semestre 2021**

**Carrera o Licenciatura para la cual se dicta: Química Ambiental**

**Profesor: Dr. Boris Weiss**

**Ayudante: Dr.(c) Diego Muñoz**

**Horario:**

Clases: Martes 1<sup>er</sup> bloque y Jueves 3<sup>er</sup> bloque ,

Ayudantías: Lunes 3<sup>er</sup> bloque

Laboratorios: Jueves 4<sup>o</sup>-5<sup>o</sup> bloque (Sesiones a convenir)

**Evaluación** (indicar número y tipo de evaluaciones y ponderaciones para el cálculo de la nota final):

**Pruebas de Cátedra:** Tres pruebas parciales con una ponderación de 1/3 cada una. PARA APROBAR EL CURSO LAS NOTAS DE CÁTEDRA DEBEN PROMEDIAR MÍNIMO 4.0 y vale 80% de la nota final.

**Laboratorios Computacionales:** Ayudantías, Informes y Tareas, valen 20% de la nota final.

**Objetivos del curso**

En este curso se estudian los principios fundamentales de tres tópicos muy relacionados entre si y que constituyen los cimientos del sorprendente avance tecnológico experimentado por la civilización en los últimos 100 años. Estos tres tópicos son: Mecánica Cuántica, Espectroscopía Molecular y Mecánica Estadística. El primero, además de cambiar significativamente nuestra percepción de la naturaleza, nos introduce en el concepto de cuantización de la energía y del espacio. El segundo nos permite obtener experimentalmente como se estructura esta cuantización en los distintos tipos de energías moleculares, mediante la interacción entre la radiación electromagnética (REM), y la materia (la luz es solo la región visible del espectro electromagnético). Finalmente, el último tema nos permite integrar este conocimiento en un modelo estadístico de distribución de moléculas en estos estados energéticos, que da cuenta del comportamiento experimental de muestras macroscópicas de materia, y proporciona las bases moleculares de principios fundamentales hasta ahora incuestionables, como son las leyes de la termodinámica.

## PROGRAMA DEL CURSO

### **I. Introducción a la Mecánica Cuántica**

1. Mecánica Clásica y sus deficiencias
2. Experimentos de la Física Moderna
3. La Ecuación de Schrödinger
4. Principios de la Mecánica Cuántica

### **II. Mecánica Cuántica : Aplicaciones**

1. Movimiento Traslacional
2. Movimiento Rotacional
3. Movimiento Vibracional
4. Otras Aplicaciones

### **III. Estructura Atómica y Molecular**

1. El Atomo de Hidrógeno
2. Atomos Polielectrónicos
3. Aproximación de Born-Oppenheimer
4. Estructura de Moléculas Diatómicas
5. Estructura de Moléculas Poliatómicas: Teoría de Orbitales Moleculares

### **IV. Espectroscopía Molecular**

1. Fundamentos de la Espectroscopía
2. Espectroscopía Rotacional
3. Espectroscopías Vibracionales: IR y Raman
4. Espectroscopías Electrónicas: Absorción y Emisión
5. Resonancia Magnética Nuclear
6. Resonancia del Spin del Electrón

### **V. Estructura Dinámica y Reactividad de Estados Electrónicos**

1. Superficies de Energía Potencial
2. Principio de Franck-Condon
3. Estados Electrónicos y Acoplamientos
4. Fotofísica Molecular
5. Aspectos Básicos de Fotoquímica

### **VI. Termodinámica Estadística**

1. Distribución de Estados Moleculares
2. Energía Interna y Entropía
3. La Función de Distribución Canónica
4. Funciones de Partición Moleculares
5. Funciones Termodinámicas
6. Aplicaciones

### **Bibliografía**

1. P.W. Atkins and J. de Paula, Elements in Physical Chemistry, 5<sup>th</sup> edition, 2009, Oxford U. Press.
2. P.W. Atkins, "Physical Chemistry", 4<sup>th</sup> edition Freeman.
3. D. A. McQuarrie and J.D. Simon "Physical Chemistry: A Molecular Approach " University Science Books, 1997.
4. I. Levine, "Physical Chemistry", 4<sup>th</sup> edition, McGraw-Hill, 1994.

PROGRAMA DETALLADO

Nº sesión	Sesión	Tema	Profesor
1	Semana 1	Introducción a la Mecánica Cuántica	Boris Weiss
2	" "	Introducción a la Mecánica Cuántica	B.W.
3	" "	Introducción a la Mecánica Cuántica	Diego Muñoz
4	Semana 2	Introducción a la Mecánica Cuántica	B.W.
5	" "	Introducción a la Mecánica Cuántica	B. W.
6	" "	Introducción a la Mecánica Cuántica	D.M.
7	Semana 3	Mecánica Cuántica: Aplicaciones	B.W.
8	" "	Mecánica Cuántica: Aplicaciones	B.W.
9	" "	Mecánica Cuántica: Aplicaciones	D.M.
10	Semana 4	Mecánica Cuántica: Aplicaciones	B.W.
11	" "	Mecánica Cuántica: Aplicaciones	B.W.
12	" "	Mecánica Cuántica: Aplicaciones	D.M.
13	Semana 5	Mecánica Cuántica: Aplicaciones	B.W.
14	" "	Mecánica Cuántica: Aplicaciones	B.W.
15	" "	Mecánica Cuántica: Aplicaciones	D.M.
16	Semana 6	Mecánica Cuántica: Aplicaciones	B.W.
17	" "	Estructura Atómica y Molecular	B.W.
18	" "	Estructura Atómica y Molecular	D.M.
19	Semana 7	Estructura Atómica y Molecular	B.W.
20	" "	Estructura Atómica y Molecular	B.W.
21	" "	Estructura Atómica y Molecular	D.M.
22	Semana 8	Estructura Atómica y Molecular	B.W.
23	" "	<b>Primera Prueba</b>	B.W./D.M.
24	Semana 10	Espectroscopía Molecular	B.W.
25	" "	Espectroscopía Rotacional	B.W.
26	" "	Espectroscopía Rotacional	B.W.
27	Semana 11	Espectroscopía Vibracional	D.M.
28	" "	Espectroscopía Vibracional	B.W.
29	" "	Espectroscopía Rotación-Vibración	B.W.
30	Semana 10	Espectroscopía Electrónica	D.M.
31	" "	Espectroscopía Electrónica	B.W.
32	" "	<b>SEGUNDA PRUEBA</b>	B.W./D.M.
33	Semana 11	Espectroscopía RMN	B.W.
34	" "	Espectroscopía RMN	B.W.
35	" "	Espectroscopía RMN	D.M.
36	Semana 12	Espectroscopía RMN	B.W.
37	" "	Espectroscopía RMN	B.W.
38	" "	Espectroscopía RMN	D.M.
39	Semana 13	Termodinámica Estadística	B.W.
40	" "	Termodinámica Estadística	B.W.
41	" "	Termodinámica Estadística	D.M.
42	Semana 14	Termodinámica Estadística	B.W.
43	" "	Termodinámica Estadística	D.M.
44	" "	Termodinámica Estadística	B.W.
45	Semana 15	Termodinámica Estadística	B.W.
46	" "	Termodinámica Estadística	D.M.
47	" "	Termodinámica Estadística	D.M.
48	Semana 16	<b>TERCERA PRUEBA</b>	B.W./D.M.
49	Semana 17	<b>PRUEBA RECUPERATIVA</b>	B.W./D.M.