



UNIVERSIDAD DE CHILE

PROGRAMA DE DOCTORADO EN QUIMICA

NOMBRE DEL CURSO: FISICOQUÍMICA AVANZADA 2024

Coordinador del Curso: Dr. Fernando Mendizábal E.

Profesores participantes:

Dr. Fernando Mendizábal E., Facultad de Ciencias

Dr. Pablo Jaque O., Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas

Dr. Rodrigo Ormazábal T., Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas

Dr. Germán Günther S., Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas

Carga horaria semanal: 4,5 hrs. directas

Créditos: 15

Horario de Clases:

Módulo 1: Química Cuántica;

Módulo 2: TD Estadística;

Módulo 3: Espectroscopía;

Módulo 4: Teorías Estadísticas de las Reacciones Químicas;

PROPOSITOS

El propósito de este curso que el alumno sea capaz de analizar fenómenos físico químicos a nivel microscópico, pudiendo plantear modelos matemáticos que permitan racionalizar los comportamientos observados o predichos.

DESCRIPCIÓN DE LA ASIGNATURA

Asignatura Teórica-Empírica-Aplicada

OBJETIVOS

El objetivo de este curso es conseguir que el alumno conozca de materias fundamentales de Química Cuántica, Termodinámica Estadística, Cinética Química y Espectroscopia, desde una perspectiva microscópica, que le permitan adquirir herramientas para realizar el análisis riguroso y la predicción propiedades moleculares a partir de parámetros Físicos y Químicos y vice-versa.

CONTENIDOS

CAPITULO 1. QUÍMICA CUANTICA.

COMPLEMENTOS DE QUÍMICA Y MECANICA CUÁNTICA

El formalismo y su interpretación: teoremas y postulados básicos

El concepto de observación y medida de Mecánica Cuántica. Naturaleza estadística del formalismo.

Concepto de estado puro y estados enredados.

El operador en química cuántica.

Concepto de probabilidad y probabilidad de transición. Valores medios.

Evolución temporal. Constantes de movimiento. Teorema de Liouville y principios de conservación.

ESTRUCTURA Y ENLACE

Orbitales hidrogenoides y función de distribución radial.

El problema de N electrones. Función de onda

Determinante de Slater.

Aproximación de Born-Oppenheimer.

Niveles de energía y teoría de orbitales moleculares.

Ecuaciones de Hartree-Fock

Propiedades electrónicas de átomos y moléculas.

Enlace químico. Estructura molecular.

CAPITULO 2. TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

Mecánica Estadística Clásica de un sistema de partículas independientes. Boltzmann,

Fermi-Dirac, Bose-Einstein, Funciones termodinámicas.

Funciones de Partición y funciones termodinámicas de átomos, moléculas diatómicas y poliatómicas. Spin nuclear y efecto isotópico.

Ensamblajes Canónico y Gran Canónico. Aplicaciones y funciones termodinámicas

Fluctuaciones. Gases reales, segundo coeficiente del virial

Propiedades termodinámicas de cristales

Termodinámica Estadística Clásica

Equilibrio Químico

CAPITULO 3. ESPECTROSCOPIA

Introducción

Espectroscopia UV-Vis. Reglas de selección. Transiciones de Franck-Condon

Espectroscopia de Fluorescencia

Espectroscopia de Microondas. Niveles energéticos rotacionales de sistemas diatómicos y poliatómicos. Reglas de selección

Espectroscopia Infrarroja. Niveles energéticos vibracionales de sistemas diatómicos y poliatómicos. Reglas de selección. Teoría de grupos. Espectros rotovibracionales.

Espectroscopia Raman

CAPITULO 4. TEORÍAS ESTADÍSTICAS DE LAS REACCIONES QUÍMICAS

Introducción

Teoría de Colisiones

Teoría Simple de Colisiones

Teoría de Colisiones Modificada

Reacciones Controladas por Difusión

Reacciones Unimoleculares

Superficies de Energía Potencial

Teoría del Complejo Activado

Interpretación Termodinámica de la Teoría del Complejo Activado

Relaciones Lineales de Energía Libre

BIBLIOGRAFIA

1° R. Levine, Físico Química, Mc Graw Hill, 1991

2° P.W. Atkins, R.S Friedman “Molecular Quantum Mechanics” 3° y 4° Ed. Oxford University Press, 1997

3° D.A. McQuarrie, D.J. Simon “Physical Chemistry. A Molecular Approach” Ed. Elsevier, Academic Press, 1997

4° Ira N. Levine “Quantum Chemistry 3° Ed.”, Allyn and Bacon 1983.

5° G. Cuevas y F. Cortés “Introducción a la Química Computacional”, Fondo Cultura Económica (2003).

6° J. Bertan, V. Branchadell Gallo, M. Moreno y M. Sodupe “Química Cuántica”, Editorial Síntesis (2002).

7° A. Szabo y N. Ostlund “Modern Quantum Chemistry”, Macmillan Publishing co., inc. (1982).

8° V. Fried, H.F. Hamerka, U. Blukis, Physical Chemistry, MacMillan Publishing Co. Inc., New York, 1977.

9° P.L. Houston, Chemical Kinetics and Reaction Dynamics, Dover Publications Inc., New York, 2001.

10° J. W. Moore, R. G. Pearson, Kinetics and Mechanism, Wiley 1981

11° T. Hill, Termodinámica Estadística, Reverté,

12° A. Requena, J. Zúñiga, Espectroscopia, Pearson, 2004

METODOLOGÍA

Clases expositivas, tareas y desarrollos con asistencia de apuntes en la red, guías de problemas.

EVALUACIONES

La nota final resultará de la ponderación de 4 evaluaciones (correspondientes a cada módulo) con ponderación 25% c/u. Para aprobar el curso, se deberá obtener nota igual o superior 4 en **todos** los módulos. Los alumnos que no cumplan con esta condición deberán rendir examen. Se realizará una evaluación, examen, para cada módulo reprobado, que será evaluado con los conceptos reprobado o aprobado. En este último caso, el o los módulos reevaluados tendrán nota 4,0, que se promediará con las notas de los módulos previamente aprobados. **Aquel estudiante que no apruebe todos los módulos será reprobado.**