



Universidad Andrés Bello
Facultad de Ciencias Exactas
Doctorado en Ciencias Físicas

Física Atómica y Molecular

I.- IDENTIFICACIÓN

Nombre	:	Física Atómica y Molecular
Código	:	Indicar código de Asignatura
Tipo de Actividad	:	
Modalidad	:	Presencial
Créditos Unab	:	
Créditos SCT	:	10

II.- DESCRIPCIÓN DEL CURSO

En el curso de Física Atómica y Molecular se estudian los modelos que gobiernan las interacciones atómicas y moleculares desde un punto de vista mecano-cuántico. Entre los conceptos estudiados se consideran: Átomo de Hidrógeno, Conceptos Químicos y Técnicas Experimentales, Enlaces, interacciones moleculares, métodos espectroscópicos, entre otros.

III.- OBJETIVOS

El alumno dominará el uso de las técnicas utilizadas en física atómica y molecular para describir las interacciones a un nivel microscópico en base a los tipos de enlaces, fortaleciendo su capacidad para aplicar estas técnicas en variadas áreas de investigación, que van desde resultados experimentales, a la formulación y/o mejora de las metodologías establecidas.

IV.- RESULTADOS DE APRENDIZAJE DE ASIGNATURA

Al finalizar el curso, el alumno deberá:

- Comprender la naturaleza cuántica de las interacciones atómicas y moleculares.
- Analizar resultados de espectroscopia y correlacionarlos con interacciones atómicas y moleculares
- Aplicar diferentes técnicas provenientes de la física cuántica al desarrollo de resultados que describen la naturaleza de las interacciones de átomos y moléculas.

V.- CONTENIDOS

- Mecánica Cuántica del Átomo de Hidrógeno.
 - Movimiento en un campo central
 - La función de onda radial en un campo central
 - Función de onda radial para el hidrógeno
 - Momentum Angular, operadores y definición de estados
- Métodos de aproximación
 - Métodos Variacionales
 - Teoría de perturbaciones
 - Teorema de virial
 - Teorema de Hellman-Feynman
 - Teorema Electroestático
- Estructura y espectro atómico
 - Espectro atómico del hidrógeno
 - La estructura del Helio
 - Átomos con muchos electrones
 - Átomos en campos externos
- Aproximaciones a la estructura molecular
 - Aproximación de Born-Oppenheimer
 - Teoría de orbitales moleculares
 - Teoría de orbitales moleculares para moléculas poliatómicas
 - Teoría de bandas
- Introducción a la química computacional
 - Método de campo autoconsistente de Hartree-Fock
 - Correlación electrónica
 - Teoría del Funcional de la Densidad
 - Métodos de Gradiente y propiedades moleculares
 - Métodos Semiempíricos
 - Mecánica molecular
- Vibraciones y rotaciones moleculares
 - Transiciones espectroscópicas
 - Rotación molecular
 - Vibraciones de moléculas diatómicas
 - Vibraciones de moléculas poliatómicas
- Transiciones electrónicas moleculares
 - Estados de moléculas diatómicas
 - Transiciones vibrónicas
 - Espectro electrónico de moléculas poliatómicas
 - Estados excitados y reacciones químicas

- Propiedades eléctricas de las moléculas
 - Respuesta a campos eléctricos
 - Propiedades eléctricas del Bulk
 - Actividad Óptica
- Propiedades magnéticas de las moléculas
 - Perturbaciones magnéticas.
 - Parámetros resonancia magnética.
- Teoría de Scattering
 - Scattering elástico
 - Scattering multicanal

VI.- METODOLOGÍAS

El curso está compuesto por dos clases teóricas de 1.5 horas cronológicas a la semana, en las cuales el profesor expondrá el contenido a los alumnos/as con ejemplos y explicaciones de los conceptos. Adicionalmente habrá un taller de 1.5 horas cronológicas donde se solucionarán ejercicios con la participación activa de los estudiantes, las que podrían también requerir el uso de computadores para una mejor comprensión y aplicabilidad de lo aprendido.

VII.- MODALIDAD DE EVALUACIÓN

- Existirán 3 pruebas (P)
- Se realizarán ejercicios prácticos a entregar y/o presentar por los alumnos (E)
- La nota final será $NF = 0.6 \times P + 0.4 \times E$

VIII.- BIBLIOGRAFÍA

- Bibliografía Obligatoria
 - Foot, C. (2012). *Atomic Physics*. Oxford: Oxford University Press. ISBN-13: 978-0198506966.
 - Atkins, P. Friedman, R. (2011). *Molecular Quantum Mechanics*. Oxford: Oxford Univ. Press. ISBN 978-0199541423
 - Levine, Ira N. (2013). *Quantum Chemistry*. Pearson Education. ISBN-13: 978-0321803450
- Bibliografía Recomendada
 - March N. H. and Mucci, J. F. (1993). *Chemical Physics of Free Molecules*. Springer US. ISBN-13: 978-0306442704.
 - Haken, H. and Wolf, H.C. (2005). *The Physics of Atoms & Quanta*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. ISBN 978-3-540-20807-5

- Par, R. and Yang, W. (1994). *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford University Press, USA. ISBN 9780195092769

- Papers recomendados
 - Geerlings, P., De Proft, F. and Langenaeker, (2003) W. Conceptual Density Functional Theory. *Chemical Reviews*. 103 (5), 1793-1874. DOI: 10.1021/cr990029p
 - Pauling L. (1988) The origin and nature of the electronegativity scale. *J Chem Educ.* 65(4): 375
 - Kutzelnigg, W. (2007), What I like about Hückel theory. *J. Comput. Chem.*, 28: 25–34. doi:10.1002/jcc.20470