



DATOS IDENTIFICATIVOS

Física III

Asignatura	Física III			
Código	V11G200V01301			
Titulación	Grado en Química			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimstre
	6	OB	2	1c
Lengua	Castellano			
Impartición				
Departamento	Física aplicada Química Física			
Coordinador/a	Flores Rodríguez, Jesús Ramón			
Profesorado	Flores Rodríguez, Jesús Ramón Martínez Piñeiro, Manuel			
Correo-e	flores@uvigo.es			
Web				
Descripción	La materia pretende ser una introducción a la Mecánica Cuántica y a la Mecánica Estadística, orientada a sus aplicaciones en Química.			

Competencias

Código	
C3	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: principios de la mecánica cuántica y su aplicación en la descripción de la estructura y las propiedades de átomos y moléculas
C14	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo las macromoléculas
C19	Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica
C20	Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química
C22	Procesar datos y realizar cálculo computacional relativo a información y datos químicos
C23	Presentar material y argumentos científicos de manera oral y escrita a una audiencia especializada
D1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
D5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
D6	Manejar las matemáticas, incluyendo aspectos tales como análisis de errores, estimaciones de órdenes de magnitud, uso correcto de unidades y modos de presentación de datos
D7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
D8	Trabajar en equipo
D9	Trabajar de forma autónoma
D12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
D13	Tomar decisiones
D14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
D15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo

Resultados de aprendizaje

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje	
Describir unificadamente el campo electromagnético mediante las leyes de Maxwell. Aplicar las condiciones básicas de frontera en el vacío o en presencia de medios materiales.	C3	D1 D12 D14
Derivar la ecuación de propagación de una onda electromagnética, caracterizada a través de sus principales características. Relacionar este concepto con el espectro electromagnético.	C3	D12 D14

Explicar los fenómenos empíricos relacionados con la interacción radiación materia no explicados por la Teoría Clásica, y las soluciones propuestas para su resolución (dualidad onda corpúsculo, cuantización de la radiación).	C3	D12 D14 D15
Enunciar los postulados de la Mecánica Cuántica y sus consecuencias en la reformulación de la teoría microscópica de la Física Clásica.	C3	D1 D12 D14 D15
Explicar los fundamentos de la teoría de operadores matemáticos, incluyendo los conceptos de función y valor propio, espectro, linealidad y hermiticidad, espacio de funciones, etc.	C3	D1 D9 D12 D14
Escribir los operadores fundamentales de la Mecánica Cuántica (posición, momento lineal y angular, hamiltoniano de sistemas sencillos).	C3 C19	D1 D9 D12 D14
Aplicar los conceptos previos al estudio mecánico-cuántico de sistemas sencillos, como una partícula sometida a un potencial de pozo cuadrado infinito, o a un potencial armónico, resolviendo la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.	C3 C19	D1 D3 D6 D8 D12 D13 D14
Calcular las funciones y valores propios del operador de momento angular.	C3 C19	D6 D12 D14
Resolver las ecuaciones de onda del átomo de hidrógeno, calculando sus orbitales.	C3 C19	D6 D8 D12 D14
Resolver la ecuación de Schrödinger para átomos polielectrónicos mediante métodos aproximados.	C3 C19 C20	D1 D5 D6 D9 D12 D13 D14
Explicar de forma sencilla las transiciones entre estados y los espectros de emisión o absorción resultantes.	C3 C19 C20 C22 C23	D1 D6 D8 D9 D12 D14 D15
Enunciar las leyes de la Mecánica Estadística que rigen el comportamiento de sistemas de partículas, particularizado a la estadística de Maxwell Boltzmann. Derivar la función de partición de un sistema y conocer en detalle su significado físico.	C14 C20 C22 C23	D1 D4 D5 D6 D7 D8 D12 D13
Aplicar la estadística de Maxwell Boltzmann al caso de los gases ideales mono y poliatómicos para estimar propiedades termodinámicas a partir de propiedades microscópicas como masa, geometría molecular y frecuencias de vibración.	C14 C19	D1 D4 D5 D6 D7 D8 D12 D13

Contenidos

Tema

Campo electromagnético: ecuaciones de Maxwell. Corriente de desplazamiento
Ecuaciones de Maxwell. Energía
Ecuación de ondas

Cuantización de la radiación. Dualidad onda-corpúsculo	Catástrofe ultravioleta Efecto fotoeléctrico Rayos X. Condición de Bragg. Radiación de frenado efecto Compton Dualidad onda-corpúsculo
Principios de Mecánica Cuántica	Limitaciones de la Física Clásica y origen de la Mecánica Cuántica Hipótesis de De Broglie Relación de indeterminación Postulados de la Mecánica Cuántica Teorema del virial
Estudio mecano-cuántico de sistemas modelo	Introducción. Partícula en una caja de potencial. Oscilador armónico. Momento angular y rotor rígido.
Métodos aproximados	Introducción. Método de variaciones. Método de perturbaciones.
Átomos hidrogénicos	Introducción. Resolución de la parte radial de la ecuación de Schrödinger. Orbitales hidrogénicos. Momentos angular y magnético electrónicos. Espín electrónico. Acoplamiento espín-órbita. Estructura hiperfina. Espectros de átomos hidrogénicos.
Átomos polielectrónicos	Aproximación de electrones independientes. Principio de antisimetría. Orbitales de Slater y funciones base. Método SCF-HF. Términos y niveles electrónicos. Espectros de átomos polielectrónicos.
Mecánica Estadística	Nomenclatura y postulados. Colectivo canónico. Función de partición canónica. Sistemas de partículas no interaccionantes. Función de partición molecular. Función de partición canónica de un gas ideal puro. Ley de distribución de Boltzmann para moléculas no interaccionantes. Termodinámica estadística para gases ideales. Introducción al estudio de sistemas reales.

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Sesión magistral	26	49.4	75.4
Resolución de problemas y/o ejercicios	26	39	65
Actividades introductorias	1	0.6	1.6
Pruebas de respuesta corta	4	0	4
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	4	0	4

*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

Metodologías

	Descripción
Sesión magistral	Exposición de los aspectos fundamentales de cada tema y planteamiento de aquellos que se van a abordar en los seminarios
Resolución de problemas y/o ejercicios	Resolución de problemas numéricos, cuestiones teóricas y desarrollo de los aspectos teóricos planteados en las Clases Magistrales con la participación del alumno.
Actividades introductorias	Clase de presentación de la asignatura con exposición: de partes del temario, contenidos, reparto en pruebas cortas y examen final, normas generales de evaluación, etc.

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Sesión magistral	Respuestas a las preguntas relacionadas con la materia que planteen los alumnos en las clases de resolución de problemas y en tutorías. Los alumnos conocerán desde principio de curso los horarios de tutorías de los profesores de la materia. En las tutorías los alumnos podrán revisar sus exámenes

Resolución de problemas y/o ejercicios	Respuestas a las preguntas relacionadas con la materia que planteen los alumnos en las clases de resolución de problemas y en tutorías. Los alumnos conocerán desde principio de curso los horarios de tutorías de los profesores de la materia. En las tutorías los alumnos podrán revisar sus exámenes
--	--

Evaluación		
	Descripción	Calificación Resultados de Formación y Aprendizaje
Resolución de problemas y/o ejercicios	Básicamente se centrará en la resolución de ejercicios en el aula. No obstante, se podrá también pedir al alumno que entregue ejercicios propuestos y que el resuelva de manera autónoma. En este caso el profesor podrá pedir al alumno que le explique individualmente como ha resuelto el ejercicio.	15
Pruebas de respuesta corta	Se Celebrarán 2 pruebas de respuesta corta. Se referirán, respectivamente, a la materia de los temas 1 a 3 y 4 a 8. La superación de cada una de ellas permitirá que los alumnos puedan no volver a examinarse de esa materia en el examen final del cuatrimestre, pero no así en el examen de segunda oportunidad (junio-julio).	42.5
Pruebas de respuesta larga, de desarrollo	Al terminar el curso se celebrará una prueba completa en la que los alumnos que lo deseen podrán repetir aquellos aspectos que no superaron en las pruebas cortas realizadas.	42.5

Otros comentarios sobre la Evaluación

Durante el curso se realizarán dos pruebas cortas referidas a los temas 1-3, la primera, y a los temas 4-8, la segunda. Ambas contendrán problemas y cuestiones y su superación liberará a los alumnos de esa parte de la asignatura. De manera voluntaria, los alumnos podrán participar en la resolución de ejercicios en los seminarios o entregar ejercicios propuestos.

También podrán presentarse a un examen final, que incluirá toda la materia, que les permitirá aumentar la puntuación alcanzada en los parciales.

Todo alumno deberá alcanzar al menos una calificación de 3.5 sobre 10 en el global de sus pruebas escritas para poder acumular la puntuación correspondiente a resolución de ejercicios.

En la segunda convocatoria se mantendrá la puntuación alcanzada mediante la resolución de ejercicios. Este examen se valorará de manera semejante al examen final.

El alumno que no se presente a ninguna prueba durante el curso será calificado en primera convocatoria como no presentado.

Fuentes de información

R. Eisberg, y R. Resnick, **Física Cuántica**, 1983,

M. Alonso y E.J. Finn, **Física**, 2000,

I. N. Levine, **Fisicoquímica**, 2004,

P.W. Atkins y J. de Paula, **Atkin's Physical Chemistry**, 2014,

J. Bertrán y otros, **Química Cuántica**, 2000,

I.N. Levine, **Química Cuántica**, 2001,

En algunos casos existen otras ediciones más modernas (inglés) o antiguas (castellano)

Recomendaciones

Asignaturas que continúan el temario

Química física II/V11G200V01403

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Física: Física I/V11G200V01102

Física: Física II/V11G200V01201

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203