



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	Martínez Piñeiro, Manuel Hermida Ramón, José Manuel			
Profesorado	Hermida Ramón, José Manuel Martínez Piñeiro, Manuel Peña Gallego, María de los Ángeles			
Correo-e	mmpineiro@uvigo.es jose_hermida@uvigo.es			
Web				
Descripción general	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 polieletrónicos 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
Lección magistral	25	50	75
Resolución de problemas	26	39	65
Actividades introductorias	1	1	2
Resolución de problemas y/o ejercicios	4	0	4
Examen de preguntas 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
Lección magistral	Exposición de los aspectos fundamentales de cada tema y planteamiento de aquellos que se van a abordar en los seminarios
Resolución de problemas	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
Lección magistral	Respuestas a las preguntas que planteen los alumnos en las lecciones magistrales, 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	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	Consistirá en la resolución de ejercicios y tests en el aula. También se podrá pedir al alumno/a que entregue ejercicios propuestos que él/ella ha de resolver de manera autónoma. En este caso el profesor podrá pedir al alumno/a que le explique individualmente cómo ha resuelto el ejercicio.	25	C19 C20 C22 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Resolución de problemas y/o ejercicios	Se celebrarán 2 pruebas de respuesta corta. Se referirán, respectivamente, a los temas 1 a 3 y 4 a 8. La superación de cualquiera de ellas permitirá que los alumnos puedan no volver a examinarse de la parte correspondiente de la materia en el examen final de primera llamada (Diciembre/Enero), no así en el de segunda (Junio/Julio).	37.5	C3 C14 C19 C20	D6 D7 D9 D12 D13 D14
Examen de preguntas de desarrollo	Al terminar el primer cuatrimestre se celebrará una prueba completa (examen final) en la que los alumnos que lo deseen podrán repetir aquellos aspectos que no superaron en las pruebas cortas realizadas.	37.5	C3 C14 C19 C20	D6 D7 D9 D12 D13 D14

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 en el examen final de primera llamada (prueba completa de Diciembre/Enero), aunque podrán realizar los ejercicios correspondientes para mejorar su calificación. Las pruebas escritas representan un porcentaje mínimo del 75%. De manera voluntaria, los alumnos podrán participar en la resolución de ejercicios en los seminarios o entregar ejercicios propuestos.

Todo alumno deberá alcanzar al menos una calificación global de 3.5 sobre 10 en las pruebas escritas para poder acumular la puntuación correspondiente al apartado de Resolución de Problemas.

En la segunda convocatoria (Julio) se realizará una prueba larga completa; se mantendrá la puntuación alcanzada en el apartado de Resolución de Problemas.

El alumno que no se presente a ninguna prueba escrita (corta o larga) durante el curso será calificado como no presentado.

Fuentes de información

Bibliografía Básica

Bibliografía Complementaria

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

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

I. N. Levine, **Físicoquímica**, 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,

Recomendaciones

Asignaturas que continúan el temario

Química física II/V11G200V01403

