



IDENTIFYING DATA

Physics 3

Subject	Physics 3			
Code	V11G200V01301			
Study programme	(*)Grao en Química			
Descriptors	ECTS Credits	Choose	Year	Quadmester
	6	Mandatory	2nd	1st
Teaching language				
Department				
Coordinator	Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Lecturers	Martínez Piñeiro, Manuel Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
E-mail	mosquera@uvigo.es			
Web				
General description	(*)A materia pretende ser unha introducción á Mecánica Cuántica e a Mecánica Estadística orientada as súas aplicacións en Química.			

Competencies

Code	
A3	(*)Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: principios da Mecánica Cuántica e a súa aplicación na descrición da estrutura e as propiedades de átomos e moléculas
A14	(*)Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: relación entre propiedades macroscópicas e propiedades de átomos e moléculas individuais, incluíndo as macromoléculas
A19	(*)Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica
A20	(*)Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química
A22	(*)Procesar datos e realizar cálculo computacional relativo a información e datos químicos
A23	(*)Presentar material e argumentos científicos de xeito oral e escrita a unha audiencia especializada
B1	(*)Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade
B3	(*)Aprender de forma autónoma
B4	(*)Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
B5	(*)Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacións e manexar ferramentas informáticas básicas
B6	(*)Manexar as matemáticas, incluíndo aspectos tales como análise de erros, estimacións de ordes de magnitude, uso correcto de unidades e modos de presentación de datos
B7	(*)Aplicar os coñecementos teóricos á práctica
B8	(*)Traballar en equipo
B9	(*)Traballar de forma autónoma
B12	(*)Planificar e administrar adecuadamente o tempo
B13	(*)Tomar decisións
B14	(*) Analizar e sintetizar información e obter conclusións
B15	(*)Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo

Learning aims

Expected results from this subject	Training and Learning Results	
(*)	A3	B1 B12 B14
(*)	A3	B12 B14
(*)	A3	B1 B12 B14 B15

(*)	A3 A19	B1 B9 B12 B14
(*)	A3 A19	B3 B9 B12 B14
(*)	A3 A19	B1 B3 B6 B8 B12 B13 B14
(*)	A3 A19	B6 B12 B14
(*)	A3 A19	B6 B8 B12 B14
(*)	A3 A19 A20	B1 B5 B6 B9 B12 B13 B14
(*)	A3 A19 A20 A22 A23	B1 B6 B8 B9 B12 B14 B15
(*)	A14 A20 A22 A23	B1 B6 B12 B13 B14
(*)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.	A14 A19	B3 B4 B5 B6 B7 B8 B12 B13

Contents

Topic	
(*)Electromagnetic field: Maxwell's equations	(*)
(*)Quantum theory of radiation. Wave-particle duality.	(*)Ultraviolet Catastrophe. Photoelectric Effect. X Rays. Bragg's condition. Compton Effect. Wave-particle duality.
(*)Principles of Quantum Chemistry	(*)Limitations of Classic Physics and origin of Quantum Mechanics. De Broglie's Hypothesis. Uncertainty Principles. Quantum Mechanics Postulates. Virial Theorem.
(*)Simple Models of Quantum Chemistry	(*)Introduction Particle in a Box Harmonic Oscillator Angular Momentum and Rigid Rotor
(*)Approximation Methods in Quantum Mechanics	(*)Introducción. Variational Method. Perturbational Method.

(*)Hydrogen-like atoms	(*)Introduction. Radial Part of Schrödinger's Equation. Hydrogen-like Atomic Orbitals. Electronic Spin. Spin-Orbit Coupling. Hyperfine Structure. Atomic Hydrogen Spectrum.
(*)Polielectronic Atoms	(*)Model of Independent Electrons. Antisymmetry Principle. SCF-HF Method. Electronic terms and levels. Polielectronic Atoms Spectra.
(*)Statistical Mechanics	(*)Nomenclatura y postulados. Colectivo canónico. Función de partición canónica para un sistema de partículas no interaccionantes. Ley de distribución de Boltzmann para partículas no interaccionantes. Términos de la función de partición de un gas ideal. Termodinámica estadística de gases ideales. Termodinámica estadística de sistemas reales: fuerzas intermoleculares e integral de configuración.

Planning

	Class hours	Hours outside the classroom	Total hours
Master Session	26	49.4	75.4
Troubleshooting and / or exercises	26	39	65
Introductory activities	1	0.6	1.6
Short answer tests	4	0	4
Long answer tests and development	4	0	4

*The information in the planning table is for guidance only and does not take into account the heterogeneity of the students.

Methodologies

	Description
Master Session	(*)Presentación dos temas por parte do profesor.
Troubleshooting and / or exercises	(*)Resolución individual ou en grupo de problemas e cuestións, tanto titorizado polo profesor na aula como traballo autónomo do alumno.
Introductory activities	(*)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.

Personalized attention

Methodologies	Description
Master Session	
Troubleshooting and / or exercises	

Assessment

	Description	Qualification
Troubleshooting and / or exercises	(*)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. 	10
Short answer tests	(*)Celebraranse probas de resposta curta polo total da asignatura	45
Long answer tests and development	(*)O remata-lo curso celebrarase unha proba completa.	45

Other comments on the Evaluation

We will have two short exams along the course, both of them will include numerical exercises and theoretical questions. The first short exam will be on topics 1-3, while the second one will cover topic 4 to 6. Topics 7 and 8 will be asked only in the final examination. The students could also obtain additional points solving exercises in the class room. They could also attend a final exam covering the whole subject. This final examination could also be employed to improve the marks obtained in the short ones.

In order to sum additional points all the students should obtain, at least, 4 over 10 as an average of his/her examinations.

Sources of information

J. Bertrán y otros, **Química Cuántica**, 2000,
M. Alonso y E.J. Finn, **Física**, 1976,
R. Eisberg, y R. Resnick, **Física Cuántica**, 1983,
I. N. Levine, **Fisicoquímica**, 2004,

Recommendations

Subjects that continue the syllabus

Physical chemistry 2/V11G200V01403

Subjects that it is recommended to have taken before

Physics: Physics 1/V11G200V01102
Physics: Physics 2/V11G200V01201
Mathematics: Mathematics 1/V11G200V01104
Mathematics: Mathematics 2/V11G200V01203
