



DATOS IDENTIFICATIVOS

Física III

| | | | | |
|-----------------------|--|--------|-------|--------------|
| Materia | Física III | | | |
| Código | V11G200V01301 | | | |
| Titulación | Grao en Química | | | |
| Descritores | Creditos ECTS | Sinale | Curso | Cuadrimestre |
| | 6 | OB | 2 | 1c |
| Lingua de impartición | Castelán | | | |
| 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 | | | | |
| Descrición xeral | A materia pretende ser unha introdución á Mecánica *Cuántica e á Mecánica Estatística, orientada ás súas aplicacións en Química. | | | |

Competencias

| | |
|--------|--|
| Código | |
| C3 | 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 |
| C14 | 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 |
| C19 | Aplicar os coñecementos e a comprensión á resolución de problemas cuantitativos e cualitativos de natureza básica |
| C20 | Avaliar, interpretar e sintetizar datos e información química |
| C22 | Procesar datos e realizar cálculo computacional relativo a información e datos químicos |
| C23 | Presentar material e argumentos científicos de xeito oral e escrita a unha audiencia especializada |
| D1 | Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade |
| D3 | Aprender de forma autónoma |
| D4 | Procurar e administrar información procedente de distintas fontes |
| D5 | Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacións e manexar ferramentas informáticas básicas |
| D6 | 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 |
| D7 | Aplicar os coñecementos teóricos á práctica |
| D8 | Traballar en equipo |
| D9 | Traballar de forma autónoma |
| D12 | Planificar e administrar adecuadamente o tempo |
| D13 | Tomar decisións |
| D14 | Analizar e sintetizar información e obter conclusións |
| D15 | Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo |

Resultados de aprendizaxe

| Resultados previstos na materia | Resultados de Formación e Aprendizaxe | |
|---|---------------------------------------|-------------------|
| Describir *unificadamente o campo electromagnético mediante as leis de *Maxwell. Aplicar as condicións básicas de fronteira no baleiro ou en presenza de medios materiais. | C3 | D1 D12 D14 |
| Derivar a ecuación de propagación dunha onda electromagnética, caracterizada a través dos seus principais características. Relacionar este concepto co espectro electromagnético. | C3 | D12 D14 |
| Explicar os fenómenos empíricos relacionados coa interacción radiación materia non explicados pola Teoría Clásica, e as solucións propostas para a súa resolución (dualidade onda *corpúsculo, *cuantización da radiación). | C3 | D12 D14 D15 |

| | | |
|--|-----------|--|
| Enunciar os postulados da Mecánica *Cuántica e as súas consecuencias na reformulación da teoría C3 *microscópica da Física Clásica. | | D1 D12 D14 D15 |
| Explicar os fundamentos da teoría de operadores matemáticos, incluíndo os conceptos de función C3 e valor propio, espectro, *linealidad e *hermiticidad, espazo de funcións, etc. | | D1 D9 D12 D14 |
| Escribir os operadores fundamentais da Mecánica *Cuántica (posición, momento lineal e angular, C3 *hamiltoniano de sistemas sinxelos). C19 | | D1 D9 D12 D14 |
| Aplicar os conceptos previos ao estudo mecánico-*cuántico de sistemas sinxelos, como unha C3 partícula sometida a un potencial de pozo cadrado infinito, ou a un potencial harmónico, C19 resolvendo a ecuación de *Schrödinger independente do tempo. | | D1 D3 D6 D8 D12 D13 D14 |
| Calcular as funcións e valores propios do operador de momento angular. | C3 C19 | D6 D12 D14 |
| Resolver as ecuacións de onda do átomo de hidróxeno, calculando os seus orbitais. | C3 C19 | D6 D8 D12 D14 |
| Resolver a ecuación de *Schrödinger para átomos *polieletrónicos mediante métodos C3 aproximados. C19 C20 | | D1 D5 D6 D9 D12 D13 D14 |
| Explicar de forma sinxela as transicións entre estados e os espectros de emisión ou absorción C3 resultantes. C19 C20 C22 C23 | | D1 D6 D8 D9 D12 D14 D15 |
| Enunciar as leis da Mecánica Estatística que rexen o comportamento de sistemas de partículas, C14 *particularizado á estatística de *Maxwell *Boltzmann. Derivar a función de *partición dun sistema C20 e coñecer en detalle o seu significado físico. C22 C23 | | D1 D4 D5 D6 D7 D8 D12 D13 |
| Aplicar a estatística de *Maxwell *Boltzmann ao caso dos gases ideais mono e *poliatómicos para C14 estimar propiedades termodinámicas a partir de propiedades *microscópicas como masa, C19 xeometría molecular e frecuencias de vibración. | | D1 D4 D5 D6 D7 D8 D12 D13 |

Contidos

Tema

| | |
|---|---|
| Campo electromagnético: ecuacións de *Maxwell. Corrente de desprazamento Ecuacións de *Maxwell. Enerxía Ecuación de ondas | |
| *Cuantización da radiación. Dualidade onda- *corpúsculo | Catástrofe *ultravioleta Efecto *fotoeléctrico RAIOS X. Condición de *Bragg. Radiación de freado efecto *Compton Dualidade onda-*corpúsculo |

| | |
|--|---|
| Principios de Mecánica *Cuántica | Limitacións da Física Clásica e orixe da Mecánica *Cuántica Hipótese de De *Broglie Relación de *indeterminación Postulados da Mecánica *Cuántica *Teorema do *virial |
| Estudo mecano-*cuántico de sistemas modelo | Introdución. Partícula nunha caixa de potencial. *Oscilador harmónico. Momento angular e *rotor ríxido. |
| Métodos aproximados | Introdución. Método de variacións. Método de perturbacións. |
| Átomos *hidrogénicos | Introdución. Resolución da parte radial da ecuación de *Schrödinger. Orbitais *hidrogénicos. Momentos angular e magnético electrónicos. *Espín electrónico. Axuste *espín-órbita. Estrutura *hiperfina. Espectros de átomos *hidrogénicos. |
| Átomos *polieletrónicos | Aproximación de electróns independentes. Principio de *antisimetría. Orbitais de *Slater e funcións basee. Método *SCF-*HF. Termos e niveis electrónicos. Espectros de átomos *polieletrónicos. |
| Mecánica Estatística | Nomenclatura e postulados. Colectivo *canónico. Función de *partición *canónica. Sistemas de partículas non *interaccionantes. Función de *partición molecular. Función de *partición *canónica dun gas ideal puro. Lei de distribución de *Boltzmann para moléculas non *interaccionantes. Termodinámica estatística para gases ideais. Introdución ao estudo de sistemas reais. |

Planificación

| | Horas na aula | Horas fóra da aula | Horas totais |
|--|---------------|--------------------|--------------|
| Sesión maxistral | 26 | 49.4 | 75.4 |
| Resolución de problemas e/ou exercicios | 26 | 39 | 65 |
| Actividades introdutorias | 1 | 0.6 | 1.6 |
| Probas de resposta curta | 4 | 0 | 4 |
| Probas de resposta longa, de desenvolvemento | 4 | 0 | 4 |

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientador, considerando a heteroxeneidade do alumnado.

Metodoloxía docente

| | Descrición |
|---|--|
| Sesión maxistral | *Exposición dos aspectos fundamentais de cada tema e formulación daqueles que se van a abordar nos seminarios |
| Resolución de problemas e/ou exercicios | Resolución de problemas numéricos, cuestións teóricas e desenvolvemento dos aspectos teóricos expostos nas Clases Maxistrais coa participación do alumno. |
| Actividades introdutorias | Clase de presentación da materia con exposición: de partes do temario, contidos, repartición en probas curtas e exame final, normas xerais de avaliación, etc. |

Atención personalizada

| Metodoloxías | Descrición |
|---|--|
| Sesión maxistral | Respostas ás preguntas relacionadas coa materia que expoñan os alumnos nas clases de resolución de problemas e en *tutorías. Os alumnos coñecerán desde principio de curso os horarios de *tutorías dos profesores da materia. Nas *tutorías os alumnos poderán revisar os seus exames |
| Resolución de problemas e/ou exercicios | Respostas ás preguntas relacionadas coa materia que expoñan os alumnos nas clases de resolución de problemas e en *tutorías. Os alumnos coñecerán desde principio de curso os horarios de *tutorías dos profesores da materia. Nas *tutorías os alumnos poderán revisar os seus exames |

| Avaliación | | |
|--|--|---|
| | Descrición | Cualificación Resultados de Formación e Aprendizaxe |
| Resolución de problemas e/ou exercicios | Basicamente centrarase na resolución de exercicios na aula. No entanto, poderase *tamien pedir ao alumno que entregue exercicios propostos e que o resolva de maneira autónoma. Neste caso o profesor poderá pedir ao alumno que lle explique *individualmente como resolveu o exercicio. | 15 |
| Probas de resposta curta | Celebraranse 2 probas de resposta curta. Referiranse, respectivamente, á materia dos temas 1 a 3 e 4 a 8. A superación de cada unha delas permitirá que os alumnos poidan non volver examinarse desa materia no exame final do cuadrimestre, pero non así no exame de segunda oportunidade (xuño-xullo). | 42.5 |
| Probas de resposta longa, de desenvolvemento | Ao terminar o curso celebrarase unha proba completa na que os alumnos que o desexen poderán repetir aqueles aspectos que non superaron nas probas curtas realizadas. | 42.5 |

Outros comentarios sobre a Avaliación

Durante o curso realizaranse dúas probas curtas referidas aos temas 1-3, a primeira, e aos temas 4-8, a segunda. Ambas conterán problemas e cuestións e a súa superación liberará aos alumnos desa parte da materia. De maneira voluntaria, os alumnos poderán participar na resolución de exercicios nos seminarios ou entregar exercicios propostos. Tamén poderán presentarse a un exame final, que incluírá toda a materia, que lles permitirá aumentar a puntuación alcanzada nos parciais. Todo alumno deberá alcanzar polo menos unha cualificación de 3.5 sobre 10 no global das súas probas escritas para poder acumular a puntuación correspondente a resolución de exercicios.

Na segunda convocatoria manterase a puntuación alcanzada mediante a resolución de exercicios. Este exame valorarase de maneira semellante ao exame final.

O alumno que non se presente a ningunha proba durante o curso será cualificado en primeira convocatoria como non presentado.

Bibliografía. Fontes 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,

Recomendacións

Materias que continúan o temario

Química física II/V11G200V01403

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Física: Física I/V11G200V01102

Física: Física II/V11G200V01201

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203