



## 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	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				
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	
Descibir de xeito unificado 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 das súas 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 microscópica da Física Clásica.	C3	D1 D12 D14 D15
Explicar os fundamentos da teoría de operadores matemáticos, incluíndo os conceptos de función e valor propio, espectro, linealidad e hermiticidade, espazo de funcións, etc.	C3	D1 D9 D12 D14
Escribir os operadores fundamentais da Mecánica Cuántica (posición, momento lineal e angular, hamiltoniano de sistemas sinxelos).	C3 C19	D1 D9 D12 D14
Aplicar os conceptos previos ao estudo mecánico-cuántico de sistemas sinxelos, como unha partícula sometida a un potencial de pozo cadrado infinito, ou a un potencial harmónico, resolvendo a ecuación de Schrödinger independente do tempo.	C3 C19	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 polielectrónicos mediante métodos aproximados.	C3 C19 C20	D1 D5 D6 D9 D12 D13 D14
Explicar de forma sinxela as transicións entre estados e os espectros de emisión ou absorción resultantes.	C3 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, particularizado á estatística de Maxwell-Boltzmann. Derivar a función de partición dun sistema e coñecer en detalle o seu significado físico.	C14 C20 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 estimar propiedades termodinámicas a partir de propiedades microscópicas como masa, xeometría molecular e frecuencias de vibración.	C14 C19	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 rixido.
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
Lección maxistral	25	50	75
Resolución de problemas	26	39	65
Actividades introdutorias	1	1	2
Resolución de problemas e/ou exercicios	4	0	4
Exame de preguntas 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
Lección maxistral	Exposición dos aspectos fundamentais de cada tema e formulación daqueles que se van a abordar nos seminarios
Resolución de problemas	Resolución de problemas numéricos, cuestións teóricas e desenvolvemento dos aspectos teóricos expostos nas Clases Maxistras 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
Lección maxistral	Respostas ás preguntas relacionadas coa materia que expoñan os alumnos nas lecciones magistrales 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	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
-------------------------	---

<b>Avaliación</b>				
	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe	
Resolución de problemas	Consistirá na resolución de exercicios e tests na aula. Poderase tamén pedir ao alumno que entregue exercicios propostos e que os resolva de maneira autónoma. Neste caso o profesor poderá pedir ao alumno/a que lle explique individualmente como resolveu o exercicio.	25	C19 C20 C22 C23	D1 D3 D4 D5 D6 D7 D8 D9 D12 D13 D14 D15
Resolución de problemas e/ou exercicios	Celebraranse 2 probas de resposta curta. Referiranse, respectivamente, á os temas 1 a 3 e 4 a 8. A superación de cada unha delas permitirá que os alumnos poidan non volver examinarse da correspondente parte da materia no exame final (Decembro/Xaneiro), non así no exame de segunda oportunidade (Xuno/Xullo).	37.5	C3 C14 C19 C20	D6 D7 D9 D12 D13 D14
Exame de preguntas de desenvolvemento	Ao terminar o curso celebrarase unha proba completa (exame final) na que os alumnos que o desexen poderán repetir aqueles aspectos que non superaron nas probas curtas realizadas.	37.5	C3 C14 C19 C20	D6 D7 D9 D12 D13 D14

### **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 no exame final de primeira chamada (Decembro/Xaneiro), aínda que poderán facer os correspondentes exercicios para mellorar a súa calificación. As probas escritas representan una porcentaxe mínima do 75%. De maneira voluntaria, os alumnos poderán participar na resolución de exercicios nos seminarios ou entregar exercicios propostos.

Todo alumno deberá alcanzar polo menos unha cualificación global de 3.5 sobre 10 nas súas probas escritas para poder acumular a puntuación correspondente ao apartado de Resolución de Problemas.

Na segunda convocatoria (Xullo) haberá un proba completa; manterase a puntuación alcanzada no apartado de Resolución de Problemas.

O alumno que non se presente a ningunha proba escrita (curta ou longa) durante o curso será cualificado como non presentado.

### **Bibliografía. Fontes 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, **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

