



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 *polielectrónicos 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-	Catástrofe *ultravioleta
*corpúsculo	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 *polielectrónicos	Aproximación de electróns independentes. Principio de *antisimetría. Orbitais de *Slater e funcións basee. Método *SCF-*HF. Termos e niveis electrónicos. Espectros de átomos *polielectrónicos.
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 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
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