



## DATOS IDENTIFICATIVOS

### Física III

|                     |                                                                                                                                       |            |       |             |
|---------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|-------|-------------|
| Asignatura          | Física III                                                                                                                            |            |       |             |
| Código              | V11G200V01301                                                                                                                         |            |       |             |
| Titulación          | Grado en Química                                                                                                                      |            |       |             |
| Descriptores        | Creditos ECTS                                                                                                                         | Seleccione | Curso | Cuatrimstre |
|                     | 6                                                                                                                                     | OB         | 2     | 1c          |
| Lengua Impartición  |                                                                                                                                       |            |       |             |
| Departamento        | Física aplicada<br>Química Física                                                                                                     |            |       |             |
| Coordinador/a       | Mosquera Castro, Ricardo Antonio                                                                                                      |            |       |             |
| Profesorado         | Martínez Piñeiro, Manuel<br>Mosquera Castro, Ricardo Antonio                                                                          |            |       |             |
| Correo-e            | mosquera@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 de titulación

|        |                                                                                                                                                                                                                              |
|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Código |                                                                                                                                                                                                                              |
| A3     | 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 |
| A14    | 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      |
| A19    | Aplicar dicho conocimiento y comprensión a la resolución de problemas cuantitativos y cualitativos de naturaleza básica                                                                                                      |
| A20    | Evaluar, interpretar y sintetizar datos e información química                                                                                                                                                                |
| A22    | Procesar datos y realizar cálculo computacional relativo a información y datos químicos                                                                                                                                      |
| A23    | Presentar material y argumentos científicos de manera oral y escrita a una audiencia especializada                                                                                                                           |
| B1     | Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad                                                                                                                               |
| B3     | Aprender de forma autónoma                                                                                                                                                                                                   |
| B4     | Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes                                                                                                                                                               |
| B5     | Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas                                                                                                               |
| B6     | 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                                                  |
| B7     | Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica                                                                                                                                                                             |
| B8     | Trabajar en equipo                                                                                                                                                                                                           |
| B9     | Trabajar de forma autónoma                                                                                                                                                                                                   |
| B12    | Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo                                                                                                                                                                               |
| B13    | Tomar decisiones                                                                                                                                                                                                             |
| B14    | Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones                                                                                                                                                                     |
| B15    | Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo                                                                                                                                                               |

## Competencias de materia

| 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.         | A3                                    | B1<br>B12<br>B14 |
| (*)Derivar la ecuación de propagación de una onda electromagnética, caracterizada a través de sus principales características. Relacionar este concepto con el espectro electromagnético. | A3                                    | B12<br>B14       |

|                                                                                                                                                                                                                                                          |                                |                                                |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------|------------------------------------------------|
| (*)Enunciar los postulados de la Mecánica Cuántica y sus consecuencias en la reformulación de la teoría microscópica de la Física Clásica.                                                                                                               | A3                             | B1<br>B12<br>B14<br>B15                        |
| (*)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.                                                                  | A3<br>A19                      | B1<br>B9<br>B12<br>B14                         |
| (*)Escribir los operadores fundamentales de la Mecánica Cuántica (posición, momento lineal y angular, hamiltoniano de sistemas sencillos).                                                                                                               | A3<br>A19                      | B3<br>B9<br>B12<br>B14                         |
| (*)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.   | A3<br>A19                      | B1<br>B3<br>B6<br>B8<br>B12<br>B13<br>B14      |
| (*)Calcular las funciones y valores propios del operador de momento angular.                                                                                                                                                                             | A3<br>A19                      | B6<br>B12<br>B14                               |
| (*)Resolver las ecuaciones de onda del átomo de hidrógeno, calculando sus orbitales.                                                                                                                                                                     | A3<br>A19                      | B6<br>B8<br>B12<br>B14                         |
| (*)Resolver la ecuación de Schrödinger para átomos polieletrónicos mediante métodos aproximados.                                                                                                                                                         | A3<br>A19<br>A20               | B1<br>B5<br>B6<br>B9<br>B12<br>B13<br>B14      |
| (*)Explicar de forma sencilla las transiciones entre estados y los espectros de emisión o absorción resultantes.                                                                                                                                         | A3<br>A19<br>A20<br>A22<br>A23 | B1<br>B6<br>B8<br>B9<br>B12<br>B14<br>B15      |
| (*)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. | A14<br>A20<br>A22<br>A23       | B1<br>B6<br>B12<br>B13<br>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<br>A19                     | B3<br>B4<br>B5<br>B6<br>B7<br>B8<br>B12<br>B13 |

## Contenidos

| Tema                                                      |                                                                                                                                                       |
|-----------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (*)Campo electromagnético: ecuaciones de Maxwell.         | (*)Corriente de desplazamiento<br>Ecuaciones de Maxwell. Energía<br>Ecuación de ondas                                                                 |
| (*)Cuantización de la radiación. Dualidad onda-corpúsculo | (*)Catástrofe ultravioleta<br>Efecto fotoeléctrico<br>Rayos X. Condición de Bragg. Radiación de frenado<br>efecto Compton<br>Dualidad onda-corpúsculo |

|                                               |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
|-----------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| (*)Principios de Mecánica Cuántica            | (*)Limitaciones de la Física Clásica y origen de la Mecánica Cuántica<br>Hipótesis de De Broglie<br>Relación de indeterminación<br>Postulados de la Mecánica Cuántica<br>Teorema del virial                                                                                                                                                                                                    |
| (*)Estudio mecano-cuántico de sistemas modelo | (*)Introducción.<br>Partícula en una caja de potencial.<br>Oscilador armónico.<br>Momento angular y rotor rígido.                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| (*)Métodos aproximados                        | (*)Introducción.<br>Método de variaciones.<br>Método de perturbaciones.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| (*)Átomos hidrogénicos                        | (*)Introducción.<br>Resolución de la parte radial de la ecuación de Schrödinger. Orbitales hidrogénicos.<br>Momentos angular y magnético electrónicos.<br>Espín electrónico.<br>Acoplamiento espín-órbita.<br>Estructura hiperfina.<br>Espectros de átomos hidrogénicos.                                                                                                                       |
| Átomos polielectrónicos                       | Aproximación de electrones independientes.<br>Principio de antisimetría.<br>Orbitales de Slater y funciones base.<br>Método SCF-HF.<br>Términos y niveles electrónicos.<br>Espectros de átomos polielectrónicos.                                                                                                                                                                               |
| Mecánica Estadística                          | Nomenclatura y postulados. Colectivo canónico.<br>Función de partición canónica.<br>Sistemas de partículas no interaccionantes. Función de partición molecular.<br>Función de partición canónica de un gas ideal puro.<br>Ley de distribución de Boltzmann para moléculas no interaccionantes.<br>Termodinámica estadística para gases ideales.<br>Introducción al estudio de sistemas reales. |

| <b>Planificación</b>                      |                |                      |               |
|-------------------------------------------|----------------|----------------------|---------------|
|                                           | Horas en clase | Horas fuera de clase | Horas totales |
| Sesión magistral                          | 26             | 49.4                 | 75.4          |
| Resolución de problemas y/o ejercicios    | 26             | 39                   | 65            |
| Actividades introductorias                | 1              | 0.6                  | 1.6           |
| Pruebas de respuesta corta                | 4              | 0                    | 4             |
| Pruebas de respuesta larga, de desarrollo | 4              | 0                    | 4             |

\*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

| <b>Metodologías</b>                    |                                                                                                                                                                          |
|----------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                        | Descripción                                                                                                                                                              |
| Sesión magistral                       | (*)Presentación dos temas por parte do profesor.                                                                                                                         |
| Resolución de problemas y/o ejercicios | (*)Resolución individual ou en grupo de problemas e cuestións, tanto titorizado polo profesor na aula como traballo autónomo do 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. |

| <b>Atención personalizada</b>          |                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
|----------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Metodologías                           | Descripción                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
| Sesión magistral                       | 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. |
| Resolución de problemas y/o ejercicios | 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 |
|----------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------|
| Resolución de problemas y/o ejercicios | 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           |
| Pruebas de respuesta corta             | Se Celebrarán 2 pruebas de respuesta corta. Se referirán, respectivamente, a la materia de los temas 1 a 3 y 4 a 6. La superación de cada una de ellas permitirá que los alumnos puedan no volver a examinarse de esa materia en el examen final del cuatrimestre, pero no así en el examen de segunda oportunidad (junio-julio). | 45           |
| Pruebas de respuesta larga, desarrollo | Al terminar el curso se celebrará una prueba completa en la que los alumnos que lo deseen podrán repetir aquellos aspectos que no superaron en las pruebas cortas realizadas. Además se examinarán de aquellos temas que, por las limitaciones que impone cualquier cronograma, no pudieron ser evaluados en las pruebas cortas.  | 45           |

### 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 4-6, la segunda. Ambas contendrán problemas y cuestiones y su superación liberará a los alumnos de esa parte de la asignatura. De manera voluntaria, los alumnos podrán obtener puntos adicionales participando en la resolución de ejercicios en los seminarios o de manera activa en las clases.

También podrán presentarse a un examen final, que incluirá toda la materia, que les permitirá aumentar la puntuación alcanzada en los parciales. Además, el examen final contendrá apartados (obligatorios para todos los alumnos) que harán referencia a los temas 7 y 8, cuyos contenidos no pudieron evaluarse en las pruebas cortas anteriores, al no permitirlo el cronograma.

Todo alumno deberá alcanzar al menos una calificación de 4 sobre 10 en el global de sus pruebas escritas para poder acumular la puntuación correspondiente a resolución de ejercicios.

En la segunda convocatoria se mantendrá la puntuación alcanzada mediante la resolución de ejercicios. Este examen se valorará de manera semejante al examen final.

El alumno que no se presente a ninguna prueba durante el curso será calificado en primera convocatoria como no presentado.

### Fuentes de información

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,

### Recomendaciones

#### Asignaturas que continúan el temario

Química física II/V11G200V01403

#### Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Física: Física I/V11G200V01102  
Física: Física II/V11G200V01201  
Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104  
Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203