



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	Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Profesorado	Fernández Nóvoa, Alejandro Martínez Piñeiro, Manuel Mosquera Castro, Ricardo Antonio			
Correo-e	mosquera@uvigo.es			
Web				
Descrición xeral	A materia pretende ser unha introducción á Mecánica Cuántica e a Mecánica Estadística orientada as súas aplicacións en Química.			

Competencias de titulación

Código	
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
B4	Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
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
B9	Traballar de forma autónoma
B14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións
B15	Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo

Competencias de materia

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe	
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	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	B14
Enunciar los postulados de la Mecánica Cuántica y sus consecuencias en la reformulación de la teoría microscópica de la Física Clásica.	A3	B14 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 A19	B9 B14
Escribir los operadores fundamentales de la Mecánica Cuántica (posición, momento lineal y angular, hamiltoniano de sistemas sencillos).	A3 A19	B9 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 A19	B6 B14

Calcular las funciones y valores propios del operador de momento angular.	A3 A19	B6 B14
Resolver las ecuaciones de onda del átomo de hidrógeno, calculando sus orbitales.	A3 A19	B6 B14
Resolver la ecuación de Schrödinger para átomos polielectrónicos mediante métodos aproximados.	A3 A19 A20	B6 B14
Explicar de forma sencilla las transiciones entre estados y los espectros de emisión o absorción resultantes.	A3 A19 A20 A22 A23	B6 B9 B14 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 A20 A22 A23	B6 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	B4 B6 B7

Contidos

Tema

Campo electromagnético: ecuaciones de Maxwell.	Corriente de desplazamiento Ecuaciones de Maxwell. Energía Ecuación de ondas
Cuantización de la radiación. Dualidad onda-corpúsculo	Catástrofe ultravioleta Efecto fotoeléctrico Rayos X. Condición de Bragg. Radiación de frenado efecto Compton Dualidad onda-corpúsculo
Principios de Mecánica Cuántica	Introducción Revisión de conceptos previos Fundamentos matemáticos Postulados de la Mecánica Cuántica Relación de indeterminación de Heisenberg
Estudio mecano-cuántico de sistemas modelo	Introducción. Partícula en una caja de potencial. Oscilador armónico. Momento angular. Rotor rígido.
Métodos aproximados	Introducción. Método de variaciones. Método de perturbaciones. Comparación de ambos métodos.
Átomos hidrogénicos	Introducción. Resolución de la parte radial de la ecuación de Schrödinger. Orbitales hidrogénicos. Espín electrónico. Acoplamiento espín-órbita. Estructura hiperfina. Espectros atómicos.
Átomos polielectrónicos	Aproximación de electrones independientes. Principio de antisimetría. Orbitales de Slater. Funciones base. Método SCF-HF. Términos y niveles electrónicos. Espectros atómicos
Mecánica Estadística	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.

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	Presentación dos temas por parte do profesor.
Resolución de problemas e/ou exercicios	Resolución individual ou en grupo de problemas e cuestións, tanto titorizado polo profesor na aula como traballo autónomo do alumno.
Actividades introdutorias	

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Sesión maxistral	Respostas as preguntas relacionadas coa materia que plantexen os alumnos nas clases de resolución de problemas e nas titorías. Os alumnos coñecerán dende principio de curso os horarios de titorías de tódolos profesores da materia. Nas titorías os alumnos poderán revisa-los seus exames.
Resolución de problemas e/ou exercicios	Respostas as preguntas relacionadas coa materia que plantexen os alumnos nas clases de resolución de problemas e nas titorías. Os alumnos coñecerán dende principio de curso os horarios de titorías de tódolos profesores da materia. Nas titorías os alumnos poderán revisa-los seus exames.

Avaliación

	Descrición	Cualificación
Resolución de problemas e/ou exercicios	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
Probas de resposta curta	Celebraranse probas de resposta curta polo total da asignatura	45
Probas de resposta longa, de desenvolvemento	O remata-lo curso celebrarase unha proba completa.	45

Outros comentarios sobre a Avaliación

Durante el curso se realizarán dos pruebas cortas que contendrán problemas y cuestiones. La primera sobre los temas 1-4 y la segunda sobre los temas 5-7. Además se realizará un examen de toda la asignatura, en el que todos los alumnos realizarán la prueba corta del tema 8.

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 al examen final, que incluirá toda la materia, que les permitirá aumentar la puntuación alcanzada en los parciales.

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.

Bibliografía. Fontes 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,

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
