

MÓDULO	MATERIA	CURSO	SEMESTRE	CRÉDITOS	TIPO
Estructura de la Materia	Física Atómica y Molecular	4º	1º	6	Optativa
PROFESORES ⁽¹⁾			DIRECCIÓN COMPLETA DE CONTACTO PARA TUTORÍAS (Dirección postal, teléfono, correo electrónico, etc.)		
Antonio M. Lallena Rojo			Dpto. Física Atómica, Molecular y Nuclear Facultad de Ciencias. 958243216 lallena@ugr.es 3ª Planta Físicas. Despacho 134.		
			HORARIO DE TUTORÍAS Y/O ENLACE A LA PÁGINA WEB DONDE PUEDAN CONSULTARSE LOS HORARIOS DE TUTORÍAS ⁽¹⁾		
			Lunes, miércoles: 9 a 11 horas Martes: 17 a 19 horas		
GRADO EN EL QUE SE IMPARTE			OTROS GRADOS A LOS QUE SE PODRÍA OFERTAR		
Grado en Física			Grado en Química		
PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES (si procede)					
Se recomienda tener cursadas las asignaturas de Física Cuántica y el módulo de Métodos Matemáticos y Programación.					
BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (SEGÚN MEMORIA DE VERIFICACIÓN DEL GRADO)					
<p>Átomos: estructura y espectroscopía. Aproximación de campo central. Correcciones. Espectros atómicos. Rayos X.</p> <p>Moléculas: estructura y espectroscopía Aproximación de Born-Oppenheimer. Espectros vibracional-rotacional y electrónico.</p> <p>Colisiones atómicas y moleculares. Tipos de colisiones. Aproximación de Born. Simulación Monte Carlo del transporte de radiación en medios</p>					

materiales.

COMPETENCIAS GENERALES Y ESPECÍFICAS

Transversales

- CT1 Capacidad de análisis y síntesis
- CT3 Comunicación oral y/o escrita
- CT6 Resolución de problemas
- CT7 Trabajo en equipo
- CT8 Razonamiento crítico
- CT9 Aprendizaje autónomo
- CT10 Creatividad

Específicas

- CE1: Conocer y comprender los fenómenos y las teorías físicas más importantes.
- CE2: Estimar órdenes de magnitud para interpretar fenómenos diversos.
- CE5: Modelar fenómenos complejos, trasladando un problema físico al lenguaje matemático.
- CE6: Elaborar proyectos de desarrollo tecnológico y/o de iniciación a la investigación científica.
- CE7: Transmitir conocimientos de forma clara tanto en ámbitos docentes como no docentes.
- CE8: Utilizar herramientas informáticas para resolver y modelar problemas y para presentar sus resultados.
- CE9: Aplicar los conocimientos matemáticos en el contexto general de la física.

OBJETIVOS (EXPRESADOS COMO RESULTADOS ESPERABLES DE LA ENSEÑANZA)

El alumno:

- adquirirá un conocimiento de las bases físico-matemáticas que rigen las estructuras atómica y molecular;
- comprenderá las aplicaciones de la teoría cuántica en los sistemas atómico y molecular;
- obtendrá una idea detallada de los conceptos y metodologías básicas de la física atómica y molecular;
- aplicará los conocimientos adquiridos para resolver problemas concretos;
- manejará los métodos matemáticos y numéricos comúnmente utilizados en el estudio de átomos y moléculas, y
- utilizará datos experimentales para comprobar la validez de los modelos desarrollados.

TEMARIO DETALLADO DE LA ASIGNATURA

TEMARIO TEÓRICO:

1. Introducción a la física atómica.

La física atómica antes de 1913. El modelo atómico antes de 1913. La espectroscopía antes de 1913. Los modelos atómicos de Bohr y Sommerfeld. Mecánica cuántica y física atómica.

2. Estructura atómica.

Aproximación de campo central. Configuraciones, capas y subcapas. El sistema periódico de los elementos. Potenciales de ionización.

3. El método de Hartree-Fock.

Ecuaciones de Hartree-Fock. Interpretación física de las ecuaciones: el teorema de Koopman. Propiedades de los potenciales y orbitales de Hartree-Fock. Solución de las ecuaciones de Hartree-Fock.

Apéndice: El modelo estadístico de Thomas-Fermi.

4. Energía media de una configuración.

Cálculo de la energía de una configuración mediante teoría de perturbaciones. Integrales I, J y K. Energía



para átomos de capas cerradas. Energía media para grupos incompletos de electrones equivalentes.

5. La interacción spin-órbita.

Ecuación de Dirac para átomos monoeléctricos. Ecuación de Pauli y correcciones de orden $(v/c)^2$.

6. Correcciones a la aproximación de campo central: I. Acoplamiento LS.

Hipótesis del acoplamiento LS. Términos posibles de una configuración. Energía de los términos y reglas de Hund. Estructura fina de los términos. Diferencia de energía entre niveles.

7. Correcciones a la aproximación de campo central: II. Acoplamiento jj.

Hipótesis del acoplamiento jj. Efecto de la adición de una interacción electrostática débil. Acoplamiento intermedio. Transición LS a jj.

8. Espectros atómicos.

Interacción de átomos con campos electromagnéticos. Probabilidades de transición. Aproximación dipolar y reglas de selección. Espectro de átomos monoeléctricos. Espectro de los átomos alcalinos. Espectro de los átomos con dos electrones. Espectro de los átomos alcalino-térreos. Espectro de los átomos con varios electrones ópticamente activos.

9. Rayos X.

Producción de rayos X. Ley de Moseley. Terminología. Espectroscopía de rayos X.

10. Átomos en el seno de campos electromagnéticos externos.

Efectos Zeeman normal y anómalo y Paschen-Back. Efectos Stark lineal y cuadrático. Estructura hiperfina.

11. Estructura molecular.

La aproximación de Born-Oppenheimer. Rotación y vibración de moléculas diatómicas. Estructura electrónica de moléculas diatómicas. Estructura de moléculas poliatómicas.

12. Espectros moleculares.

Energía rotacional y espectros vibracional-rotacional y electrónico de moléculas diatómicas. Spin electrónico y nuclear.

13. Colisiones atómicas y moleculares.

Tipos de colisión. Dispersión por un potencial. El método de las ondas parciales. La aproximación de Born. Simulación Monte Carlo del transporte de radiación en medios materiales.

TEMARIO PRÁCTICO:

- 1.- Cálculo computacional de energías y funciones de onda atómicas.
- 2.- Simulación Monte Carlo del transporte de radiación en la materia.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL:

- B.H. Bransden & C.J. Joachain. Physics of Atoms and Molecules. Segunda edición. Longmann, 2003.
- H. Haken, H.C. Wolf & W.D. Brewer, The Physics of Atoms and Quanta: Introduction to Experiments and Theory. Springer, 2007
- H. Haken, H.C. Wolf & W.D. Brewer. Molecular Physics and elements of Quantum Chemistry: Introduction to Experiments and theory. Springer, 2004.
- D. Budker, D.F. Kimball & D.P. DeMille. Atomic Physics: An Exploration through Problems and Solutions. Oxford Univ. Press, 2000.
- F. Salvat, J.M. Fernández-Varea and J. Sempau. PENELOPE - A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport. OECD Nuclear Energy Agency, 2011

ENLACES RECOMENDADOS

- <https://www.nist.gov/pml/productsservices/physical-reference-data>
http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines_form.html
<https://www-amdis.iaea.org>



<https://nucleus.iaea.org/Pages/ambds.aspx>
https://jrm.phys.ksu.edu/atomic_database.html
<https://dbshino.nifs.ac.jp>
<http://hitran.org>

METODOLOGÍA DOCENTE

Para el desarrollo del proceso de enseñanza y aprendizaje se llevarán a cabo distintas acciones formativas que permitirán al alumnado adquirir las competencias programadas:

- Clases teóricas.
- Clases prácticas.
- Tutorías.

EVALUACIÓN (INSTRUMENTOS DE EVALUACIÓN, CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y PORCENTAJE SOBRE LA CALIFICACIÓN FINAL, ETC.)

- Para la evaluación se tendrán en cuenta los siguientes instrumentos:
 - Examen final (cuya valoración será hasta un 70% de la calificación final). Constará de una parte teórica (hasta un 20% de la calificación final) y otra de ejercicios y problemas (hasta un 50% de la calificación final)
 - Trabajo práctico (cuya valoración será hasta un 50% de la calificación final). La realización de las prácticas correspondientes y la presentación de un al respecto serán obligatorias.
- La superación de las distintas pruebas no se logrará sin un conocimiento uniforme y equilibrado de toda la materia.
- Aquellos estudiantes que se acojan a la modalidad de evaluación única final lo harán siguiendo los términos y plazos que se indican en la Normativa de la UGR al respecto.

DESCRIPCIÓN DE LAS PRUEBAS QUE FORMARÁN PARTE DE LA EVALUACIÓN ÚNICA FINAL ESTABLECIDA EN LA “NORMATIVA DE EVALUACIÓN Y DE CALIFICACIÓN DE LOS ESTUDIANTES DE LA UNIVERSIDAD DE GRANADA”

- Examen final (con una valoración del 70% de la calificación final). Constará de una parte teórica (20% de la calificación final) y otra de ejercicios y problemas (50% de la calificación final)
- Examen práctico (con una valoración del 30% de la calificación final). Deberá llevarse a cabo un ejercicio práctico de cálculo computacional de energías y funciones de onda atómicas de un átomo problema.

INFORMACIÓN ADICIONAL

Cumplimentar con el texto correspondiente en cada caso

