

Fecha de aprobación: 20/06/2022

Guía docente de la asignatura

**Física Atómica y Molecular  
(26711M1)**

<b>Grado</b>	Grado en Física	<b>Rama</b>	Ciencias				
<b>Módulo</b>	Estructura de la Materia	<b>Materia</b>	Física Atómica y Molecular				
<b>Curso</b>	4º	<b>Semestre</b>	1º	<b>Créditos</b>	6	<b>Tipo</b>	Optativa

**PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES**

Es recomendable haber superado Física Cuántica, la materia Métodos Matemáticos, y estar cursando Mecánica Cuántica.

**BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (Según memoria de verificación del Grado)**

- Estructura de átomos con uno y muchos electrones. Ecuaciones de Schrödinger y de Dirac.
- Métodos de resolución autoconsistentes de las ecuaciones de onda.
- Átomos en campos externos.
- Estructura de las moléculas diatómicas.
- Espectroscopía atómica y molecular.
- Colisiones atómicas y moleculares.

**COMPETENCIAS ASOCIADAS A MATERIA/ASIGNATURA****COMPETENCIAS GENERALES**

- CG01 - Capacidad de análisis y síntesis
- CG03 - Comunicación oral y/o escrita
- CG06 - Resolución de problemas
- CG07 - Trabajo en equipo
- CG08 - Razonamiento crítico
- CG09 - Aprendizaje autónomo
- CG10 - Creatividad



## COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE01 - Conocer y comprender los fenómenos y las teorías físicas más importantes.
- CE02 - Estimar órdenes de magnitud para interpretar fenómenos diversos.
- CE05 - Modelar fenómenos complejos, trasladando un problema físico al lenguaje matemático.
- CE06 - Elaborar proyectos de desarrollo tecnológico y/o de iniciación a la investigación científica.
- CE07 - Transmitir conocimientos de forma clara tanto en ámbitos docentes como no docentes.
- CE08 - Utilizar herramientas informáticas para resolver y modelar problemas y para presentar sus resultados.
- CE09 - Aplicar los conocimientos matemáticos en el contexto general de la física.

## RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

El alumno adquirirá:

- Un conocimiento en profundidad sobre las bases físico-matemáticas de la estructura atómica y molecular.
- Una buena comprensión de las aplicaciones en los sistemas atómico y molecular de la teoría cuántica.
- Una idea detallada de los conceptos y metodologías básicas de la física atómica y molecular modernas, así como de los problemas que se plantean en la actualidad.

El alumno será capaz de:

- Aplicar los conocimientos adquiridos para resolver problemas concretos.
- Comprender los métodos matemáticos y numéricos más comúnmente utilizados en el estudio de átomos y moléculas y dominar el uso de los mismos.
- Utilizar datos experimentales para comprobar la validez de los modelos disponibles y, eventualmente, establecer los cambios necesarios para conseguir mejorar el acuerdo.
- Evaluar correctamente órdenes de magnitud y establecer analogías entre situaciones físicamente diferentes, utilizando soluciones conocidas a nuevos problemas.

## PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

### TEÓRICO

#### 1. Estructura atómica de la materia.

##### 1.1 Introducción.

##### 1.2 Bases experimentales.

##### 1.3 Modelo de Bohr.

##### 1.4 El núcleo atómico.



## 2. Átomos con un electrón.

- 2.1 Introducción.
- 2.2 Ecuación de Schrödinger para el movimiento relativo.
- 2.3 Estructura fina.
- 2.4 Estructura hiperfina.
- 2.5 Sistemas hidrogenoides especiales.

## 3. Átomos con dos electrones.

- 3.1 Introducción.
- 3.2 Hamiltoniano no relativista. Ecuación de Schrödinger.
- 3.3 Principio de exclusión de Pauli. Funciones de onda de espín.
- 3.4 Modelo de partículas independientes.
- 3.5 Mejoras del modelo de partículas independientes. Potenciales centrales.
- 3.6 Repulsión electrónica.

### 4a. Átomos multielectrónicos I.

- 4.1 Introducción.
- 4.2 Indistinguibilidad de los electrones y principio de exclusión de Pauli.
- 4.3 Aproximación de campo central. Modelo de partículas independientes.
- 4.4 Niveles de energía. Configuración electrónica.
- 4.5 Sistema periódico de los elementos. 4.6 Métodos para evaluar el potencial central.

### 4b. Átomos multielectrónicos II.

- 4.7 Correlación electrónica y estructura fina.
- 4.8 Acoplamiento Russell  $\times$  Saunders.
- 4.9 Acoplamiento  $j \times j$ .
- 4.10 Acoplamiento intermedio.
- 4.11 Propiedades nucleares y estructura hiperfina.

## 5. Interacción Radiación-Átomo.

- 5.1 Introducción.



5.2 Coeficientes de Einstein.

5.3 Hamiltoniano de interacción.

5.4 Aproximación dipolar eléctrica.

5.5 Reglas de selección para sistemas con un electrón.

5.6 Reglas de selección para sistemas multielectrónicos.

5.7 Anchura y perfil de las líneas espectrales.

## 6. Átomos en campos externos.

6.1 Introducción.

6.2 Hamiltoniano atómico en presencia de campo magnético.

6.3 Hamiltoniano en presencia de campo eléctrico. Efecto Stark.

## 7. Física molecular. Aproximaciones iniciales.

7.1 Introducción.

7.2 Hamiltoniano molecular de moléculas diatómicas.

7.3 Aproximación de Born-Oppenheimer.

7.4 Diagrama de coordenadas configuracionales.

7.5 Origen del enlace químico.

## 8: Física molecular. Estructura electrónica.

8.1 Introducción. Orbitales moleculares.

8.2 Propiedades de simetría. Términos electrónicos.

8.3 El ion molecular  $H_2^+$ .

8.4 Moléculas multielectrónicas.

8.5 Dinámica nuclear.

8.6 Espectroscopía molecular.

## PRÁCTICO

Seminarios y talleres sobre temas especializados y/o prácticas de simulación.

## BIBLIOGRAFÍA



## BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

B.H. Bransden and C.J. Joachain. Physics of Atoms and Molecules. Segunda edición. Longmann, 2003.

## BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- E.U. Condon and H. Odabasi, Atomic Structure. Cambridge University Press, 1980.
- H. Haken, H.C. Wolf & W.D. Brewer. Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry: Introduction to experiments and theory. Springer, 2004.
- P. F. Benath, Spectra of atoms and molecules. Oxford University Press, 1995.
- H. Friedrich, Theoretical Atomic Physics, Springer-Verlag, 2006.
- M. Weissbluth, Atoms and Molecules, Academic Press, 1978.

## ENLACES RECOMENDADOS

<https://www.nist.gov/pml/productsservices/physical-reference-data>

[http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines\\_form.html](http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines_form.html)

## METODOLOGÍA DOCENTE

- MD01 - Lección magistral/expositiva

## EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)

### EVALUACIÓN ORDINARIA

La evaluación se regirá por la normativa de evaluación y de calificación de los estudiantes de la Universidad de Granada, aprobada por Consejo de Gobierno el 20 de mayo de 2013.

El sistema de calificación empleado será el establecido en el artículo 5 del Real Decreto 1125/2003, de 5 de septiembre, por el que se establece el sistema europeo de créditos y el sistema de calificaciones en las titulaciones universitarias de carácter oficial y validez en todo el territorio nacional.

De acuerdo con el Real Decreto 1125/2003, la valoración del nivel de adquisición de las competencias generales y específicas de cada materia se llevará a cabo de manera continua a lo largo de todo el periodo académico.



La **evaluación final** se realizará a partir de la evaluación de las diversas actividades que realizarán los alumnos:

- Examen final (70%). Será necesario obtener un mínimo de 5/10 para aprobar la asignatura.
- El 30% restante corresponderá a tareas de índole diversa, destinadas al seguimiento continuado de la asignatura y a completar la evaluación continua: entregas obligatorias de ejercicios resueltos, tareas wiki de Prado, pruebas de autoevaluación o exposiciones de trabajos o problemas sencillos resueltos que podrían plantearse de improviso durante una clase presencial.

### EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

Respecto a la evaluación de la **convocatoria extraordinaria**, ésta constará de una única prueba teórica, incluyendo la realización de problemas y/o cuestiones teóricas sobre el temario de la asignatura. De este modo se garantiza la posibilidad de obtener el 100% de la calificación final, tal y como se recoge en el artículo 19 de la normativa de evaluación y de calificación de los estudiantes de la Universidad de Granada, publicado en el Boletín Oficial de la Universidad de Granada no 112. 9 de noviembre de 2016.

### EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

Respecto a la evaluación de la convocatoria de **evaluación única**, ésta constará de una única prueba teórica, incluyendo la realización de problemas y/o cuestiones teóricas sobre el temario de la asignatura. De este modo se garantiza la posibilidad de obtener el 100% de la calificación final, tal y como se recoge en la citada normativa de evaluación y de calificación de los estudiantes de la Universidad de Granada.

### INFORMACIÓN ADICIONAL

Siguiendo las recomendaciones de la CRUE y del Secretariado de Inclusión y Diversidad de la UGR, los sistemas de adquisición y de evaluación de competencias recogidos en esta guía docente se aplicarán conforme al principio de diseño para todas las personas, facilitando el aprendizaje y la demostración de conocimientos de acuerdo a las necesidades y la diversidad funcional del alumnado.

