



# Grado en Física (curso 2024-25)

<b>Física Atómica y Molecular</b>		<b>Código</b>	800524	<b>Curso</b>	4º	<b>Sem.</b>	1º
<b>Módulo</b>	Física Fundamental	<b>Materia</b>	Obligatoria de Física Fundamental	<b>Tipo</b>	optativo		

	Total	Teóricos	Práct./Semin.	Lab.
<b>Créditos ECTS:</b>	6	4	2	
<b>Horas presenciales</b>	45	30	9	6

Resultados del aprendizaje (según Documento de Verificación de la Titulación)
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Saber evaluar las principales interacciones dentro de un átomo polielectrónico, entendiendo cómo éstas determinan su descripción, propiedades y niveles de energía.</li> <li>• Conocer los efectos de agentes externos (campos eléctricos, magnéticos y colisiones) sobre los átomos.</li> <li>• Entender la estructura de moléculas diatómicas y poliatómicas.</li> <li>• Conocer las propiedades de la emisión y absorción de radiación por átomos y moléculas. Comprender los procesos de fluorescencia y fosforescencia, y el fundamento de las principales técnicas espectroscópicas.</li> </ul>
Breve descripción de contenidos
Átomos polielectrónicos; interacciones electrostática y espín-órbita; acoplamiento de momentos angulares; efectos de campos externos; estructura molecular; moléculas diatómicas y poliatómicas.
Conocimientos previos necesarios
<p>Son necesarios conocimientos de Fundamentos de Mecánica Cuántica, Teoría de perturbaciones estacionarias y Acoplamiento de momentos angulares, que se habrán adquirido en las asignaturas de Física Cuántica I y II.</p> <p>También será necesario conocer el Átomo de hidrógeno, Sistemas de varios electrones, Aproximación de campo central, nociones básicas de Acoplamiento LS de momentos angulares de spin y orbital, y nociones básicas de Estructura Molecular. Todas ellas se supondrán adquiridas en la asignatura de Estructura de la Materia.</p>

<b>Profesor/a coordinador/a</b>	Jaime Rosado Vélez			<b>Dpto.</b>	EMFTEL
	<b>Despacho</b>	03.241.0	<b>e-mail</b>	<a href="mailto:jaime_ros@fis.ucm.es">jaime_ros@fis.ucm.es</a>	

Teoría/Prácticas - Detalle de horarios y profesorado								
Grupo	Aula	Día	Horario	Profesor	Fechas	horas	T/P	Dpto.
A	1	L,X	9:00-10:30	Francisco Blanco Ramos	Todo el cuatrimestre	39	T/P	EMFTEL
B (inglés)	1	We,Fr	14:00 – 15:30	Daniel Nieto Castaño	Full term	39	T/E	EMFTEL
C	1	M,J	12:00-13:30	Jaime Rosado Vélez	Todo el cuatrimestre	39	T/P	EMFTEL
D	1	M,J	18:30-20:00	Jaime Rosado Vélez	Todo el cuatrimestre	39	T/P	EMFTEL

T:teoría, P:prácticas

Tutorías				
Grupo	Profesor	horarios	e-mail	Lugar
A	Francisco Blanco Ramos	L, X: 12:00-13:30 + 3 h no presenciales: a demanda de los estudiantes.	pacobr@ucm.es	03.222.0
B	<b>ESTE GRUPO SE IMPARTE EN INGLÉS (ver ficha correspondiente)</b>			
C	Jaime Rosado Vélez	1er. sem: M, J: 15:00-16:30 2º sem: X 12:00-13:30/V: 12:30-14:00 + 3 h no presenciales: a demanda de los estudiantes.	jrosadov@ucm.es	03.241.0
D	Jaime Rosado Vélez	1er. sem: M, J: 15:00-16:30 2º sem: X 12:00-13:30/V: 12:30-14:00 + 3 h no presenciales: a demanda de los estudiantes.	jrosadov@ucm.es	03.241.0

PRÁCTICAS DE CÁLCULO NUMÉRICO				
Grupo	Lugar	Sesiones	Profesor	Horas
L1	Aula 15	L 30/09 12:00-13:30 L 07/10 12:00-13:30	Marcos López Moya	3.0
L2		M 01/10 15:30-17:00 M 8/10 15:30-17:00	Jaime Rosado Vélez	3.0
L3		X 02/10 12:00-13:30 X 09/10 12:00-13:30	Marcos López Moya	3.0
L4		X 02/10 15:30-17:00 X 09/10 15:30-17:00	Jaime Rosado Vélez	3.0
L5		V 04/10 12:00-13:30 V 11/10 12:00-13:30	Marcos López Moya	3.0
L6		<b>ESTE GRUPO SE IMPARTE EN INGLÉS (ver ficha correspondiente)</b>		

LABORATORIOS				
Grupo	Lugar	Sesiones	Profesor	Horas
L1	(*)	L 21/10 12:00-13:30 L 09/12 12:00-13:30	Víctor Moya Zamanillo Marcos López Moya	1.5 1.5
L2		L 21/10 14:00-15:30 L 09/12 14:00-15:30	Marcos López Moya Jaime Rosado Vélez	1.5 1.5
L3		L 21/10 15:30-17:00 L 09/12 15:30-17:00	Víctor Moya Zamanillo Jaime Rosado Vélez	1.5 1.5
L4		M 22/10 12:00-13:30 M 10/12 12:00-13:30	Víctor Moya Zamanillo Marcos López Moya	1.5 1.5
L5		M 22/10 14:00-15:30 M 10/12 14:00-15:30	Marcos López Moya Jaime Rosado Vélez	1.5 1.5
L6		M 22/10 15:30-17:00 M 10/12 15:30-17:00	Víctor Moya Zamanillo Jaime Rosado Vélez	1.5 1.5
L7		X 23/10 12:00-13:30 X 11/12 12:00-13:30	Víctor Moya Zamanillo Marcos López Moya	1.5 1.5
L8		X 23/10 14:00-15:30 X 11/12 14:00-15:30	Marcos López Moya Jaime Rosado Vélez	1.5 1.5
L9		X 23/10 15:30-17:00 X 11/12 15:30-17:00	Víctor Moya Zamanillo Jaime Rosado Vélez	1.5 1.5
L10		J 24/10 14:00-15:30 J 12/12 14:00-15:30	Marcos López Moya	3.0
L11		J 24/10 15:30-17:00 J 12/12 15:30-17:00	Víctor Moya Zamanillo Marcos López Moya	1.5 1.5
L12		<b>ESTE GRUPO SE IMPARTE EN INGLÉS (ver ficha correspondiente)</b>		

(\*) Laboratorio de Física Atómica, Nuclear y de Partículas.

### Programa de la asignatura

#### Física Atómica (aprox 60%)

##### 1. Introducción a los átomos polielectrónicos.

Manejo de funciones de onda antisimétricas.

Configuraciones, Degeneración, Sistema periódico.

Aproximaciones para el cálculo de la estructura atómica.

Métodos estadísticos y de Hartree. Métodos Variacionales (Hartree-Fock)

##### 2. Correcciones a la Aproximación del Campo Central.

Interacción electrostática. Términos electrostáticos y su determinación.

Cálculo de correcciones por interacción electrostática.

Interacción Spin - Órbita.

Momento angular total J y autoestados. Cálculo de constantes spin-órbita.

Aproximación de Russell Saunders.

Limitaciones del acoplamiento LS.

Otros modelos de acoplamiento, acoplamiento JJ, nociones de acoplamiento intermedio, efectos.

##### 3. Átomos en campos externos constantes.

Campos magnéticos. Límites Zeeman y Paschen-Back.

##### 4. Emisión y absorción de radiación por átomos.

Interacción con el campo electromagnético. Coeficientes de Einstein y su cálculo.

Reglas de selección. Líneas espectrales

#### Física Molecular. (Aprox 40%)

##### 5. Introducción a la estructura molecular.

Aproximación de Born Oppenheimer

Estructura de moléculas diatómicas

Función de ondas nuclear. Estados vibracionales y rotacionales.

Función de ondas electrónica. Curvas de potencial.

##### 6. Emisión y absorción de radiación por moléculas diatómicas.

Acoplamiento de momentos angulares.

Espectros rotacionales puros

Espectros vibro-rotacionales

Transiciones electrónicas. Principio de Franck-Condon

##### 7. Moléculas poliatómicas.

Orbitales moleculares, deslocalización.

Estados rotacionales y vibracionales.

Espectroscopía

### Bibliografía

#### Básica:

F. Blanco Ramos, *Introducción a la Física de Átomos y Moléculas* (Amazon 2019)

B.H.Brandsen, C.J.Joachain; *Physics of atoms and molecules* (Longman 1994)

I.I.Sobelman; *Atomic Spectra and Radiative Transitions* (Springer Verlag).

G.K.Woodgate *Elementary atomic structure* (McGraw Hill).

Atkins, P.W. *Molecular Quantum Mechanics* (3ª ed. Oxford Univ. Press 2000).

#### Complementaria:

Levine, Ira N. *Espectroscopía molecular* (Madrid : Editorial AC, D.L. 1980)

C.Sanchez del Rio *Introducción a la teoría del átomo* (Ed. Alhambra)

H.G.Kuhn *Atomic Spectroscopy* (Academic Press 1969)

Anne P.Thorne *Spectrophysics* (Chapman and Hall)

B.W.Shore and D.H.Menzel *Principles of Atomic Spectra* (John wiley 1968).

R.D.Cowan *The theory of atomic structure and spectra* (Univ. California Press)

M. Weissbluth. *Atoms and Molecules* (Academic Press 1978).

Levine, Ira N. <i>Química cuántica</i> (Madrid : Editorial AC, D.L. 1986)
<b>Recursos en internet</b>
FAYM-didactic: programas para las prácticas de cálculo numérico (F. Blanco, J. Rosado, D. Nieto): <a href="https://github.com/Pacobr/FAYM-didactic">https://github.com/Pacobr/FAYM-didactic</a>
Atomictools: a Python package to create and visualize atomic orbitals and more (A. Villar, J. Rosado): <a href="https://github.com/JaimeRosado/atomictools">https://github.com/JaimeRosado/atomictools</a>

<b>Metodología</b>
<p>Es una asignatura de carácter teórico-práctico. Se realizarán 2 prácticas de cálculo numérico en el aula de informática y 2 prácticas de laboratorio experimental. Las 4 prácticas son de carácter obligatorio.</p> <p>En las clases de teoría se utilizarán todos los medios disponibles: pizarra, proyección de transparencias y presentaciones con ordenador.</p> <p>Los conceptos teóricos explicados se reforzarán con ejercicios intercalados durante las clases. Se potenciará la colaboración de los alumnos en estos ejercicios, pudiendo pedir que los entreguen después de la clase.</p> <p>Después de cada tema se entregará una hoja de ejercicios que se resolverán completamente o dando las suficientes indicaciones para que los alumnos puedan realizarlos.</p> <p>Según el número de alumnos matriculados se podría proponer también la presentación de trabajos por parte de ellos, en grupo o individualmente</p>

<b>Evaluación</b>		
<b>Realización de exámenes</b>	<b>Peso:</b>	70%
Examen final práctico de resolución de ejercicios de nivel similar al estudiado durante el curso, pudiéndose consultar apuntes propios, libros, ejercicios resueltos, etc.		
<b>Otras actividades de evaluación</b>	<b>Peso:</b>	30%
Cuatro prácticas obligatorias. Se podrán proponer además ejercicios entregables o cuestionarios en el CV para subir nota.		
<b>Calificación final</b>		
<p>Las partes de Átomos y Moléculas del examen final se evaluarán por separado. Si en alguna de las dos partes se obtiene una calificación inferior a 3.5 sobre 10, ésta se tomará como la calificación final de la asignatura y por tanto tendrá suspendida esa convocatoria independientemente del resto de calificaciones. La calificación de cada parte del examen en la convocatoria ordinaria se podrá conservar para la convocatoria extraordinaria.</p> <p>Las 4 prácticas obligatorias tendrán un peso del 30% del total. De no realizarse alguna de ellas, la calificación de otras actividades de evaluación será 0.</p> <p>Se podrán proponer además ejercicios entregables para subir nota.</p>		