



Asignatura: Física Atómica y Molecular  
Código: 16411  
Centro: Ciencias  
Titulación: Física  
Nivel: Grado  
Tipo: Formación obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

## ASIGNATURA / COURSE TITLE

FÍSICA ATÓMICA Y MOLECULAR / ATOMIC AND MOLECULAR PHYSICS

### 1.1. Código / Course number

16411

### 1.2. Materia / Content area

Física Cuántica / Quantum Physics

### 1.3. Tipo / Course type

Formación obligatoria / Compulsory subject

### 1.4. Nivel / Course level

Grado / Bachelor (first cycle)

### 1.5. Curso / Year

4º / 4<sup>th</sup>

### 1.6. Semestre / Semester

1º / 1<sup>st</sup>

### 1.7. Idioma / Language

Español. Se emplea también el inglés en el material docente / Spanish. However, english is also extensively used in teaching material

### 1.8. Requisitos previos / Prerequisites

Es muy conveniente haber cursado las asignaturas: Electromagnetismo I y II, así como, Mecánica Cuántica I y II./ It is strongly recommended having taken: Electromagnetism I and II, as well as, Quantum Mechanics I and II



Asignatura: Física Atómica y Molecular  
Código: 16411  
Centro: Ciencias  
Titulación: Física  
Nivel: Grado  
Tipo: Formación obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

## 1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases magistrales y a las clases prácticas no es obligatoria pero es muy recomendable. / **Attendance to lectures and practical classes is not mandatory, but is strongly recommended.**

## 1.10. Datos del equipo docente / **Faculty data**

### Grupo 541 y COORDINADOR:

Fernando Jesús  
López Dominguez

Departamento / **Department:** Física de Materiales  
Facultad de Ciencias / **Faculty of Science**  
Módulo 04, despacho 602 / **Module 4, office 602-**  
Teléfono / **Phone:** 91 497 4763  
Correo electrónico / **e-mail:** fernando.lopez@uam.es  
Página Web / **Website:**  
Horario de Tutorías: a acordar previamente en clase o mediante correo electrónico / **Office hours: upon appointment**

### Grupo 546:

Rafael  
Pérez Casero

Departamento / **Department:** Física Aplicada  
Facultad de Ciencias / **Faculty of Science**  
Módulo 12, despacho 610 / **Module 12, office 610-**  
Teléfono / **Phone:** 91 497 4938  
Correo electrónico / **e-mail:** rafael.perez@uam.es  
Página Web / **Website:**  
Horario de Tutorías: a acordar previamente en clase o mediante correo electrónico / **Office hours: upon appointment**

## 1.11. Objetivos del curso / **Course objectives**

Partiendo de experimentos clave y de los principios fundamentales de la Mecánica Cuántica, se pretende que el alumno comprenda los aspectos cuánticos que gobiernan la estructura electrónica del átomo aislado y de moléculas simples. Asimismo debe ser capaz de trabajar con las diversas interacciones eléctricas y magnéticas internas.



Asignatura: Física Atómica y Molecular  
Código: 16411  
Centro: Ciencias  
Titulación: Física  
Nivel: Grado  
Tipo: Formación obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

El estudiante debe aprender a manejar con soltura los diferentes modelos que se estudian, así como las sucesivas aproximaciones empleadas, para ser capaz de obtener de forma cualitativa, y cuantitativa en algunos casos, el esquema de niveles de energía de los diferentes átomos de la tabla periódica y de moléculas simples.

Por otra parte, el alumno abordará el estudio de la interacción del átomo con campos magnéticos o eléctricos externos y con la radiación electromagnética. Esto debe servirle como iniciación a la Espectroscopía y para relacionar las propiedades del átomo con las de los sólidos estudiadas en otras asignaturas.

On the basis of key experiments and the fundamental principles of quantum mechanics, it is intended that the student understands the quantum aspects governing the electronic structure of the isolated atom and simple molecules. It must also be capable of working with the various internal electrical and magnetic interactions.

The student must learn to handle with ease the different models that are studied, as well as the successive approximations employed, to be able to obtain in qualitative form (and quantitative in some cases), the scheme of energy levels of the different atoms in the periodic table and simple molecules.

On the other hand, the student will deal with the study of the interaction of an atom with external electric or magnetic fields and electromagnetic radiation. This should serve as introduction to spectroscopy and to relate the properties of the atoms with those of solids, studied in other subjects.

## 1.12. Contenidos del programa / Course contents

### Bloque I - FÍSICA ATÓMICA

1. ESTRUCTURA ATÓMICA DE LA MATERIA
  - Introducción
  - Bases experimentales
  - Modelo atómico de Bohr-Sommerfeld
  - El núcleo atómico
2. ÁTOMOS CON UN ELECTRÓN
  - Aproximación no relativista
  - Correcciones relativistas. El espín del electrón. Estructura fina
  - El espín nuclear. Estructura hiperfina
  - Sistemas hidrogenoides especiales
3. ÁTOMOS CON DOS ELECTRONES
  - Hamiltoniano no relativista
  - Papel del Principio de Exclusión de Pauli



Asignatura: Física Atómica y Molecular  
Código: 16411  
Centro: Ciencias  
Titulación: Física  
Nivel: Grado  
Tipo: Formación obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

- Modelo de partículas independientes. Configuraciones y términos
  - Mejoras del modelo. Potenciales centrales. Repulsión electrónica
  - Tratamiento perturbativo. Método variacional
4. **ÁTOMOS MULTIELECTRÓNICOS**
- Aproximación del campo central
  - Configuraciones electrónicas. Sistema periódico
  - Método estadístico de Thomas-Fermi
  - Método autoconsistente de Hartree-Fock
  - Mejoras del modelo. Correlación electrónica, estructura fina
  - Acoplamiento Russell-Saunders. Reglas de Hund
  - Acoplamientos j-j e intermedio
  - Propiedades nucleares y estructura hiperfina
5. **INTERACCIÓN RADIACIÓN-ÁTOMO**
- Coeficientes de Einstein
  - Hamiltoniano de interacción. Absorción y emisión
  - Probabilidad de transición. Aproximación dipolar eléctrica
  - Reglas de selección en las distintas aproximaciones
6. **ÁTOMOS EN CAMPOS MAGNÉTICOS Y ELÉCTRICOS**
- Hamiltoniano atómico en presencia de un campo magnético. Términos paramagnético y diamagnético
  - Efectos Zeeman y Paschen-Back. Reglas de selección para transiciones
  - Hamiltoniano atómico en presencia de un campo eléctrico. Efecto Stark lineal y cuadrático

## Bloque II - FÍSICA MOLECULAR

7. **ESTRUCTURA MOLECULAR I: APROXIMACIONES INICIALES**
- Introducción. Hamiltoniano molecular
  - Aproximación de Born-Oppenheimer
  - Diagrama de coordenadas configuracionales
  - Origen del enlace químico
8. **ESTRUCTURA MOLECULAR II: DINÁMICA ELECTRÓNICA**
- Clasificación y notación de los estados electrónicos
  - El ion molecular  $H_2^+$ . Orbitales moleculares CLOA
  - La molécula  $H_2$
  - Moléculas simples
9. **ESTRUCTURA MOLECULAR III: DINÁMICA NUCLEAR**
- Descomposición del Hamiltoniano nuclear
  - Niveles rotacionales
  - Niveles vibracionales. Aproximación parabólica. Potencial de Morse



Asignatura: Física Atómica y Molecular  
Código: 16411  
Centro: Ciencias  
Titulación: Física  
Nivel: Grado  
Tipo: Formación obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

10. ESPECTROSCOPIA MOLECULAR
- Espectroscopía rotacional
  - Espectroscopía vibro-rotacional
  - Espectros electrónicos

### Part I - ATOMIC PHYSICS

1. THE ATOMIC NATURE OF MATTER
  - Introduction
  - Experimental discoveries
  - The Bohr model of the atom
  - The atomic nucleus
2. ONE-ELECTRON ATOMS
  - Non relativistic Hamiltonian
  - Relativistic Hamiltonian. Electron spin. Fine structure
  - The nuclear spin. Hyperfine structure
  - Special hydrogenic systems
3. TWO-ELECTRON ATOMS
  - Non relativistic Hamiltonian
  - Role of the Pauli exclusion principle
  - The independent particle model
  - Model improvements. Central potentials. Electron repulsion
  - Perturbative and variational methods
4. MANY-ELECTRON ATOMS
  - The central field approximation
  - Electronic configurations. The periodic system of the elements
  - The Thomas-Fermi method
  - The Hartree-Fock self-consistent method
  - Corrections to the central field approximation: electronic correlation and fine structure
  - The L-S coupling. Hund's rules
  - The j-j and intermediate couplings
  - Hyperfine structure
5. INTERACTION OF ATOMS WITH ELECTROMAGNETIC RADIATION
  - Einstein coefficients
  - Interaction Hamiltonian and perturbation theory
  - Transition rates. Dipole approximation
  - Selection rules



Asignatura: Física Atómica y Molecular  
Código: 16411  
Centro: Ciencias  
Titulación: Física  
Nivel: Grado  
Tipo: Formación obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

6. INTERACTION OF ATOMS WITH EXTERNAL STATIC ELECTRIC AND MAGNETIC FIELDS
- Hamiltonian of the interaction of atoms with static magnetic fields
  - Zeeman and Paschen-Back effects. Selection rules for transitions
  - Hamiltonian of the interaction of atoms with static electric fields
  - Stark effect

## Part II - MOLECULAR PHYSICS

7. MOLECULAR STRUCTURE I: INITIAL APPROACH
- Introduction. Molecular Hamiltonian
  - The Born-Oppenheimer approximation
  - Configurational coordinate diagram
  - Origin of the chemical bond
8. MOLECULAR STRUCTURE II: ELECTRON DYNAMICS
- Classifying and designation of the electronic states
  - The molecular ion  $\text{H}_2^+$ . Molecular orbitals LCAO
  - The  $\text{H}_2$  molecule
  - Simple molecules
9. MOLECULAR STRUCTURE III: NUCLEAR DYNAMICS
- Decomposition of nuclear Hamiltonian
  - Rotational levels
  - Vibrational levels. Parabolic approximation. Morse potential
10. MOLECULAR SPECTRA
- Rotational spectra
  - Vibro-rotational spectra
  - Electronic spectra

## 1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

- *Physics of Atoms and Molecules*  
B.H. Bransden and C.J. Joachain. Second Edition. Pearson Education Ltd. (Essex, 2003).
- *Física Cuántica. Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos y Partículas*  
R. Eisberg y R. Resnick. Limusa (México, 1996).
- *Introducción a la Teoría del Átomo*  
C. Sánchez del Río. Alhambra (Madrid, 1977).



Asignatura: Física Atómica y Molecular  
Código: 16411  
Centro: Ciencias  
Titulación: Física  
Nivel: Grado  
Tipo: Formación obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

- *The Physics of Atoms and Quanta*  
H. Haken and H.C. Wolf. Springer-Verlag (Berlin, 1993).
- *Quantum Mechanics*  
C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë. Hermann and Wiley & sons Inc. (Paris, 1977).
- Física Cuántica  
C. Sánchez del Río (coordinador). Pirámide (Madrid, 2003).

## 2. Métodos docentes / Teaching methodology

La enseñanza y el aprendizaje de la asignatura se estructuran en clases teóricas y clases prácticas de resolución de problemas impartidas por el profesor. En las clases teóricas el profesor explica los conceptos esenciales y los métodos de resolución contenidos en el programa de la asignatura. Las clases prácticas están orientadas a la resolución de problemas propuestos con antelación para que los estudiantes intenten resolverlos. Las tutorías individuales, permiten a los estudiantes aclarar sus dudas y dificultades tanto conceptuales como prácticas. Los alumnos realizarán un trabajo sobre algún aspecto concreto de la asignatura.

The teaching and learning of the subject are structured in theoretical classes and classes of problem-solving practices taught by the teacher. In theoretical classes the Professor explains the core concepts and methods of resolution contained in the agenda of the subject. Practical classes are aimed at solving problems proposed in advance so that the students try to solve them. The individual tutorials allow students to clarify their doubts and both conceptual and practical difficulties. Students will make a report on a particular aspect of the subject.

## 3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

TIPO DE ACTIVIDAD DOCENTE y TIEMPO DE TRABAJO DEL ALUMNO EN HORAS		Nº de horas	%
Presencial	Clases teóricas	43	41
	Clases prácticas	12	
	Evaluaciones	4	
	Tutorías	3	
No presencial	Estudio de teoría y resolución de problemas	70	59



Asignatura: Física Atómica y Molecular  
Código: 16411  
Centro: Ciencias  
Titulación: Física  
Nivel: Grado  
Tipo: Formación obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

	Preparación y redacción de trabajo	18	
<b>Carga total de horas de trabajo: 25 horas x 6 ECTS</b>		150	100

#### 4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

Tanto en las convocatorias ordinaria como extraordinaria se realizará un examen final con cuestiones teóricas y resolución de problemas. A lo largo del curso se realizará un examen parcial, voluntario, que puntuará para la convocatoria ordinaria.

La calificación final para superar la asignatura será de 5 sobre 10. Dicha calificación, en la convocatoria ordinaria, estará constituida por:

- Exámenes parcial y/o final: 70% de la calificación final. La nota del parcial contribuirá en un 40% de este apartado, si mejora la nota del examen final; si la empeora, no se tendrá en cuenta.
- Trabajos y/o resolución de problemas: 30% de la calificación final.
- El estudiante que no realice el examen final será calificado en la convocatoria ordinaria como “no evaluado”.
- Nota: para superar la asignatura, la nota del apartado de exámenes deberá ser al menos de 5 sobre 10.

En la convocatoria extraordinaria, la calificación final estará constituida por:

- Examen final extraordinario: 70% de la calificación final.
- Trabajos y/o resolución de problemas: 30% de la calificación final. Si en la calificación ordinaria se obtuvo una calificación menor de 5 puntos en este apartado, se re-evaluará en la extraordinaria; en caso contrario se conservará la nota de la convocatoria ordinaria.
- El estudiante que no realice el examen final será calificado en la convocatoria extraordinaria como “no evaluado”.
- Nota: para superar la asignatura, la nota del examen final extraordinario deberá ser al menos de 5 sobre 10.

#### 5. Cronograma\* / Course calendar





Asignatura: Física Atómica y Molecular  
Código: 16411  
Centro: Ciencias  
Titulación: Física  
Nivel: Grado  
Tipo: Formación obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

Tema	Tipología	Horas Presenciales Contact hours	Parcial
1	Clases Teóricas	3,5	
	Prácticas	1	
2	Clases Teóricas	5,5	
	Prácticas	1,5	
3	Clases Teóricas	5	
	Prácticas	1	
4	Clases Teóricas	8,5	
	Prácticas	2,5	
5	Clases Teóricas	5,5	
	Prácticas	1,5	
6	Clases Teóricas	4,5	4
	Prácticas	2,5	
7	Clases Teóricas	2	
	Prácticas	0	
8	Clases Teóricas	3,5	
	Prácticas	0	
9	Clases Teóricas	1,5	
	Prácticas	1	
10	Clases Teóricas	3	
	Prácticas	1	

\*Este cronograma tiene carácter orientativo