



Asignatura: Física Atómica y Molecular
Código: 16411
Centro: Ciencias
Titulación: Física
Curso Académico: 2017 - 2018
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/Coursetype

Formación obligatoria / Compulsory subject

1.4. Nivel / Course level

Grado/Bachelor (first cycle)

1.5. Curso / Year

4º/4th

1.6. Semestre / Semester

1º / 1st

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
Curso Académico: 2017 - 2018
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**

COORDINADOR:

Fernando Jesús
López Domínguez

Departamento / **Department:** Física de Materiales
Facultad de Ciencias / **Faculty of Science**
Módulo 04, despacho 602 / **Module 04, 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**

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.

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.

Con este planteamiento se pretende que los alumnos desarrollen las competencias siguientes, recogidas en la Memoria de Verificación del Grado, y correspondientes al módulo "Física Cuántica y Física de sistemas de muchas partículas", al que pertenece esta asignatura:



Asignatura: Física Atómica y Molecular
Código: 16411
Centro: Ciencias
Titulación: Física
Curso Académico: 2017 - 2018
Tipo: Formación obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

- A3. Tener un conocimiento en profundidad de las bases de la física moderna.
- A4. Conocer los últimos avances en las especialidades actuales de la física.
- A5. Ser capaz de resolver problemas en física identificando los principios físicos relevantes.
- A6. Ser capaz de extraer lo esencial de un proceso o situación y establecer un modelo matemático del mismo, realizando las aproximaciones requeridas con el objeto de reducir el problema hasta un nivel manejable.
- A13. Ser capaz de presentar resultados científicos propios o resultados de búsquedas bibliográficas, tanto a profesionales como a público en general.
- A15. Ser capaz de buscar y utilizar bibliografía en física y otra bibliografía técnica, así como cualquier otra fuente de información relevante para trabajos de investigación y desarrollo técnico de proyectos.
- A19. Ser capaz de comprender textos técnicos en inglés.
- B1. Capacidad de análisis y síntesis.
- B3. Capacidad de comunicación.
- B13. Habilidad para trabajar de forma autónoma.

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.

This approach is intended that students develop the following skills:

- A3. Having a thorough knowledge of the foundations of modern physics.
- A4. Knowing the latest developments in the current specialties of physics.
- A5. Being able to solve problems in physics by identifying the relevant physical principles.
- A6. Being able to extract the essence of a process or situation and establish a mathematical model of it, making the approaches required in order to reduce the problem to a manageable level.
- A13. Be able to present own scientific results or literature searches, both professionals and the general public.
- A15. Being able to search for and use physical and other technical literature, as well as any other relevant source of information for research and technical development of projects.
- A19. Being able to understand technical texts in English.



Asignatura: Física Atómica y Molecular
Código: 16411
Centro: Ciencias
Titulación: Física
Curso Académico: 2017 - 2018
Tipo: Formación obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

B1. Capability for analysis and synthesis.
B3. Capability for communication.
B13. Ability to work autonomously.

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
 - 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
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
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 H_2^+ . Molecular orbitals LCAO



Asignatura: Física Atómica y Molecular
Código: 16411
Centro: Ciencias
Titulación: Física
Curso Académico: 2017 - 2018
Tipo: Formación obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

- The H₂ 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).
- *Atoms and Molecules: an introduction for students of Physical Chemistry*
M. Karplus and R.N. Porter. Benjamin Inc. (Philippines, 1970).
- *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).
- *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).



Asignatura: Física Atómica y Molecular
Código: 16411
Centro: Ciencias
Titulación: Física
Curso Académico: 2017 - 2018
Tipo: Formación obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

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

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



Asignatura: Física Atómica y Molecular
Código: 16411
Centro: Ciencias
Titulación: Física
Curso Académico: 2017 - 2018
Tipo: Formación obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

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.
- Redacción de un trabajo sobre algún aspecto concreto de la asignatura: 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.
- Trabajo sobre algún aspecto concreto de la asignatura: 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.

Los exámenes evalúan las competencias del alumno en cuanto al conocimiento y comprensión de las leyes y principios fundamentales de la física, los contenidos específicos de la asignatura y las bases de la física moderna, así como la competencia en la resolución de problemas identificando los principios físicos relevantes y aplicando los modelos matemáticos requeridos. También son evaluadas competencias transversales relativas a la capacidad de análisis y síntesis.

Competencias que se evalúan: A3, A5, A6.

La calificación del trabajo evalúa las competencias del alumno en cuanto al conocimiento y comprensión de los contenidos de la asignatura y los últimos avances en las especialidades actuales de la física, así como la capacidad de presentar resultados científicos propios o resultado de búsquedas bibliográficas. También son evaluadas competencias transversales relativas a la capacidad de análisis y síntesis,



Asignatura: Física Atómica y Molecular
Código: 16411
Centro: Ciencias
Titulación: Física
Curso Académico: 2017 - 2018
Tipo: Formación obligatoria
Nº de créditos: 6 ECTS

de comunicación, aprendizaje y trabajo autónomo, habilidades informáticas básicas y de búsqueda y gestión de información e interés por la calidad.
Competencias que se evalúan: A4, A13, A15, A19, B1, B3, B13.

5. Cronograma*/ Course calendar

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