

Plan 277 Lic. en Fís-ica

Asignatura 44061 FÍSICA ATOMICA

Grupo 1

### Presentación

Estructura electrónica y espectroscopía de átomos y moléculas

### Programa Básico

1. Interacción Radiación-Materia en Átomos de un electrón. Niveles de energía y funciones propias. Valores esperados; teorema del virial. Interacción con la radiación electromagnética: ritmos de transición, aproximación dipolar y coeficientes de Einstein. Reglas de selección, Intensidades, forma y anchura de las líneas espectrales. Efecto fotoeléctrico. Estructuras fina e hiperfina. Efectos Stark y Zeeman.

2. Correlaciones electrónicas en átomos con dos electrones: modelo de partículas independientes. Funciones de onda spin-orbitales y el principio de exclusión de Pauli. Esquemas de niveles. Modelo de partículas independientes. Estado fundamental y estados excitados. Correlación Coulombiana. Efecto Auger y Resonancias.

3. Átomos de muchos electrones: estructura e interacción con campos externos. Aproximación del campo central. Sistema periódico. Modelo Thomas-Fermi. Método Hartree-Fock y campo autoconsistente. Correcciones a la aproximación de campo central: acoplamiento L-S y j-j. Regla de Hund. Interacción spin-órbita. Regla de Landé. Momentos dipolares magnéticos y cuadrupolares eléctricos de los núcleos. Estructura hiperfina. Átomos en campos electromagnéticos externos. Espectros de alcalinos y alcalinos térreos. Estructura de multipletes. Efecto Zeeman. Efecto Stark cuadrático. Espectros de rayos X.

4. Fundamentos de la teoría cuántica del enlace químico. Estructura y aspectos moleculares. Moléculas diatómicas: espectros electrónicos. Espectros de vibración-rotación. Enlaces covalentes. Enlace metálico. Aproximación de Born-Oppenheimer. Estructura electrónica de moléculas diatómicas.

### Objetivos

Estudio de los conceptos teóricos y de los hechos experimentales básicos sobre el comportamiento electrónico y atómico de la materia, y su relación con otros campos como el enlace químico, la óptica, el láser y la física de estado sólido.

### Programa de Teoría

1. Interacción Radiación-Materia en Átomos de un electrón. Niveles de energía y funciones propias. Valores esperados; teorema del virial. Interacción con la radiación electromagnética: ritmos de transición, aproximación dipolar y coeficientes de Einstein. Reglas de selección, Intensidades, forma y anchura de las líneas espectrales. Efecto fotoeléctrico. Estructuras fina e hiperfina. Efectos Stark y Zeeman.

2. Correlaciones electrónicas en átomos con dos electrones: modelo de partículas independientes. Funciones de onda spin-orbitales y el principio de exclusión de Pauli. Esquemas de niveles. Modelo de partículas independientes. Estado fundamental y estados excitados. Correlación Coulombiana. Efecto Auger y Resonancias.

3. Átomos de muchos electrones: estructura e interacción con campos externos. Aproximación del campo central. Sistema periódico. Modelo Thomas-Fermi. Método Hartree-Fock y campo autoconsistente. Correcciones a la aproximación de campo central: acoplamiento L-S y j-j. Regla de Hund. Interacción spin-órbita. Regla de Landé. Momentos dipolares magnéticos y cuadrupolares eléctricos de los núcleos. Estructura hiperfina. Átomos en campos electromagnéticos externos. Espectros de alcalinos y alcalinos térreos. Estructura de multipletes. Efecto Zeeman. Efecto Stark cuadrático. Espectros de rayos X.

4. Fundamentos de la teoría cuántica del enlace químico. Estructura y aspectos moleculares. Moléculas diatómicas: espectros electrónicos. Espectros de vibración-rotación. Enlaces covalentes. Enlace metálico. Aproximación de Born-

### Programa Práctico

Se realizarán algunas prácticas de laboratorio, de ordenador, y visitas a laboratorios de investigación

---

### Evaluación

Es obligatoria la entrega de una práctica (realizada con la aplicación MATHEMATICA, y/o FORTRAN), o la realización de un trabajo bibliográfico (Ver Lista de Trabajos en el apartado Ficheros Adjuntos). Una vez que dicha práctica o trabajo sea declarada apta, después de exponerla oralmente, la calificación de la asignatura se determina mediante la realización de un examen escrito de problemas (se permite uso de libros) y cuestiones (sin libros ni apuntes).

Se realizarán controles periódicos (cada dos semanas) de problemas propuestos para hacer en casa. Si la calificación obtenida en estos controles es " aprobado " o más, puede prescindirse del examen final.

---

### Bibliografía

- \* BRANSDEN AND JOACHAIN., Physics of atoms and molecules, Longman.
  - \* HAKEN AND WOLF., Atomic and Quantum Physics, Springer- Verlag.
  - \* SÁNCHEZ DEL RÍO, Introducción a la teoría del átomo, Alhambra.
-