

Plan 469 GRADO EN FISICA

Asignatura 45778 FISICA ATOMICA

Grupo 1

Tipo de asignatura (básica, obligatoria u optativa)

Optativa

Créditos ECTS

6 ECTS

Competencias que contribuye a desarrollar

2.1

Transversales

- T1: Capacidad de análisis y de síntesis.
- T2: Capacidad de organización y planificación.
- T3: Capacidad de comunicación oral y escrita.
- T4: Capacidad de resolución de problemas.
- T5: Capacidad de trabajar en equipo.
- T7: Capacidad de trabajo y aprendizaje autónomo.
- T8: Capacidad de adaptación a nuevas situaciones.
- T9: Creatividad.

2.2

Específicas

- E1: Adquirir una comprensión de la naturaleza de la investigación, de las formas en que se lleva a cabo y de cómo la investigación en Física es aplicable a muchos campos diferentes.
- E2: Ser capaz de presentar un tema académico o una investigación propia tanto a profesionales como a público en general.
- E3: Ser capaz de comparar nuevos datos experimentales con modelos disponibles para revisar su validez y sugerir cambios con el objeto de mejorar la concordancia de los modelos con los datos.
- E4: Ser capaz de iniciarse en nuevos campos a través de estudios independientes.
- E5: Ser capaz de evaluar claramente los ordenes de magnitud, de desarrollar una clara percepción de las situaciones que son físicamente diferentes, pero que muestran analogías y, por lo tanto, permiten el uso de soluciones conocidas a nuevos problemas.
- E6: Ser capaz de realizar las aproximaciones requeridas con el objeto de reducir un problema hasta un nivel manejable.
- E8: Ser capaz de buscar y utilizar bibliografía en Física, así como cualquier fuente de información relevante para trabajos de investigación y desarrollo técnico de proyectos.
- E9: Estar adecuadamente preparado para ejercitar una labor docente.
- E10: Ser capaz de mantenerse informado de los nuevos desarrollos.
- E11: Adquirir familiaridad con las fronteras de la investigación.
- E12: Tener una buena comprensión de las teorías físicas más importantes, de su estructura lógica y matemática y su soporte experimental.
- E13: Ser capaz de integrar los conocimientos recibidos de las diferentes áreas de la Física para la resolución de un problema.
- E14: Familiarizarse con los modelos experimentales más importantes, y ser capaz de realizar experimentos independientemente, así como describir, analizar y evaluar críticamente los datos.
- E15: Comprender y dominar el uso de los métodos matemáticos y numéricos más comúnmente utilizados.

Objetivos/Resultados de aprendizaje

Tras un seguimiento serio y satisfactorio de la asignatura, el alumno debe ser capaz de:

- Manejar con soltura las unidades de la escala atómica.
- Conocer y manejar con soltura el teorema de Wigner-Eckart, las reglas de selección, la estructura fina e hiperfina y los efectos Stark y Zeeman en átomos, tanto de un electrón como multi-electrónicos.
- Entender y aplicar los conceptos de correlación de Pauli y de Coulomb en átomos de varios electrones.

-
- Entender la estructura electrónica de átomos polieletrónicos en la aproximación del campo central, así como la teoría de campo auto consistente de Hartree-Fock.
 - Conocer y entender la estructura de multipletes de estructura fina e hiperfina y el efecto Zeeman asociado, con sus aplicaciones en la construcción de relojes atómicos o en técnicas de resonancia magnética.
 - Conocer los fundamentos de la teoría cuántica del enlace químico, la aproximación de Born-Oppenheimer y la estructura electrónica de moléculas diatómicas. Iniciarse en el conocimiento de las mismas propiedades en moléculas poli-atómicas.
 - Conocer y manejar los espectros de vibración-rotación en moléculas simples e iniciarse en el estudio de las mismas propiedades en moléculas complejas.
 - Iniciarse en el conocimiento de los grupos puntuales de simetría en sistemas moleculares, y de cómo ayudan a simplificar la resolución de problemas.
- Aparte de los resultados del aprendizaje que hemos resumido, y que están reflejados en los contenidos de la asignatura, ésta debe servir también para que el alumno desarrolle competencias transversales y específicas.
-

Contenidos

El programa está estructurado en dos partes bien diferenciadas: átomos (parte 1) y moléculas (parte 2). Cada parte contiene varios temas, que se detallan a continuación:

Parte 1. Átomos.

Tema 0. Preliminares. Resultados y teoremas importantes

- Átomo de hidrógeno (repasso) y sistemas hidrogenoides. Teorema del virial.
- Componentes esféricas de un vector.
- Operadores tensoriales irreducibles y teorema de Wigner-Eckart.
- Operadores multipolares eléctricos. Simetría y reglas de selección.

Tema 1. Estructura fina del átomo de Hidrógeno

- Correcciones relativistas: variación de la masa con la velocidad, acoplo espín-órbita, y término de Darwin.
- Estructura fina de los espectros atómicos. Intensidad relativa de las líneas espectrales.
- Efecto Lamb y otras correcciones (cualitativo).

Tema 2. Estructura hiperfina

- Hamiltoniano de interacción hiperfina magnética.
- Estructura hiperfina de los espectros atómicos. Regla del intervalo de Landé.
- Efectos isotópicos. Efecto de volumen nuclear finito.
- Interacción cuadrupolar eléctrica y otras correcciones (cualitativo).

Tema 3. Átomos multi-electrónicos. Átomo de Helio

- Aproximación de campo central. Tabla periódica. Configuración electrónica.
- Estado fundamental del Helio. Función de onda de dos electrones.
- Cálculo perturbativo. Términos espectrales. Tripletes y singletes.
- Integrales Directa y de Intercambio.
- Transiciones entre niveles de un electrón.

Tema 4. Electrones independientes: modelo autoconsistente de Hartree-Fock

- Átomos alcalinos: El defecto cuántico. Efectos finos e hiperfinos.
- Determinante de Slater. Propiedades.
- Ecuaciones de Hartree-Fock: elementos de matriz y cálculo variacional.
- Discusión física: teoremas de Koopmans y Brillouin. Correlación electrónica.
- Solución numérica de la ecuación HF en átomos.

Tema 5. Correlaciones y estructura fina. Acoples LS y jj

- Correlación estática y dinámica. Interacción de configuraciones.
- Estructura fina en acoplamiento L-S. Términos espectrales y reglas de Hund.
- Acoplamientos j-j e intermedio.
- Reglas de selección.

Tema 6. Campos magnéticos estáticos. Efecto Zeeman

- Campos fuertes y débiles: efectos Zeeman normal y anómalo. Efecto Paschen-Back.
- Regla de Landé. Cálculo del factor g de Landé.
- Campos débiles y estructura hiperfina. Resonancia en haces atómicos y relojes atómicos.

Tema 7. Campos eléctricos estáticos. Efecto Stark

- Campos fuertes. Efecto Stark cuadrático y lineal. Polarizabilidad del átomo de hidrógeno.
- Transiciones y reglas de selección. Ionización por campo.
- Campos débiles en átomos multi-electrónicos.

Tema 8. Interacción entre átomos y radiación

- Hamiltoniano del campo de radiación.
- Cuantización del campo de radiación.
- Hamiltoniano de interacción y elementos de matriz.
- Reglas de selección y distribuciones angulares.
- Probabilidades de transición. Absorción y emisión.
- Coeficientes de Einstein y Ley de Planck.
- Intensidades de oscilador y reglas de suma.
- Anchura de líneas espectrales.

Parte 2. Moléculas.

Tema 9. Simetrías en moléculas

- Simetrías rotacionales y grupos puntuales de las moléculas. Clasificación y notación.
- Tablas de multiplicación, representaciones matriciales reducibles e irreducibles.
- Caracteres y clases. Teoremas de ortogonalidad.
- Bases adaptadas a la simetría. Ejemplos de aplicaciones.

Tema 10. Estructura molecular

- Aproximación de Born-Oppenheimer
- Estructura electrónica de moléculas diatómicas: Orbitales moleculares.
- Orbitales moleculares en moléculas poli-atómicas: uso de la simetría.
- Método Roothaan-Hartree-Fock. Elección del conjunto base.
- Métodos de correlación electrónica: interacción de configuraciones, Moller-Plesset, y otros.
- Métodos semi-empíricos; Hückel, potenciales parametrizados.

Tema 11. Vibración y rotación moleculares

- Espectros de absorción, emisión, y Raman.
- Rotación molecular: distorsión centrífuga, reglas de selección y estadística nuclear.
- Vibración molecular: efectos no armónicos, reglas de selección, espectros roto-vibracionales.
- Moléculas poli-atómicas: modos normales y efecto de Coriolis.

Tema 12. Transiciones electrónicas en moléculas

- El espín electrónico y los casos de Hund. Doblete Lambda.
- Transiciones vibrónicas. Principio de Franck-Condon.
- Algunas propiedades eléctricas, magnéticas y ópticas de las moléculas (nivel informativo).

Principios Metodológicos/Métodos Docentes

Entre las actitudes generales que la metodología docente tratará de potenciar con vistas a lograr los objetivos, tanto de aprendizaje de conocimientos como de desarrollo de competencias transversales y específicas, cabe mencionar las siguientes:

1. Adquisición por el alumno de un lenguaje formalizado. Resulta imprescindible para el análisis adecuado de los problemas. Los problemas y los razonamientos lógicos se deben efectuar usando un lenguaje correcto y preciso.
2. Aprendizaje del razonamiento lógico-deductivo. Es fundamental para lograr una buena formación del futuro físico y para que éste pueda desenvolverse adecuadamente después en su trabajo.
3. Utilización de manera adecuada del rigor y de la intuición. Este punto de vista ayuda tanto a que los programas se abarquen en su totalidad como a mostrar al alumno lo conveniente que es saber mezclar el rigor matemático con la intuición que, como físico, debe tener.
4. Potenciación de su capacidad de trabajo y de aprendizaje. Es muy importante transmitir al estudiante ciertos hábitos de trabajo que le serán muy útiles en el futuro: acostumbrarse a profundizar en los contenidos que se exponen en clase, hacer problemas por su cuenta.
5. Fomento de la habilidad de cálculo.
6. Fomento del espíritu crítico.
7. Creación de un buen ambiente en las clases. Se trata de que el ambiente no sea tenso y el alumno se sienta con la libertad de plantear sus dudas en clase.
8. Comunicación fluida entre profesor y alumno.
9. Trabajo en equipo. Es importante motivar a los alumnos para que efectúen algunas actividades en grupo, con otros compañeros, y no estudien siempre de forma individual.
10. Ampliar horizontes. Proponer a los estudiantes, por ejemplo, la asistencia a los seminarios generales que se organizan en la Facultad, o a algunos del Departamento, para que descubran aspectos nuevos e interesantes de alguna rama de la Ciencia, y en particular, aplicaciones de la Mecánica Cuántica en diversos campos de investigación.
11. Organización de información y dotes de orador. Se propondrá a cada alumno la exposición de un trabajo ante sus compañeros, con ronda de preguntas al final de la exposición. Es importante que el alumno aprenda a extraer de su trabajo la idea fundamental que quiere comunicar en unos pocos minutos y la manera más efectiva de hacerlo.

ACTIVIDADES ACADÉMICAS Y DE ORGANIZACIÓN

La enseñanza se llevará a cabo por medio de una serie de actividades académicas, a saber: clases teóricas, clases de problemas, resolución y presentación de problemas por los alumnos, seminarios, horas de consulta, y evaluación de los conocimientos. Aunque se fija un número de horas semanales para tutorías, el profesor estará disponible, en la

medida de lo posible, también fuera de ese horario.

Clases de teoría

Las clases de teoría se dedican a la exposición por parte del profesor de los temas del programa, y constituyen por lo tanto la "espinosa dorsal" de la asignatura. Para estas exposiciones se utilizará el cañón proyector. Los ficheros pdf de las exposiciones se pondrán a disposición de los alumnos por adelantado.

Clases de problemas

Los problemas propuestos al alumno serán aplicaciones, ilustraciones y complementos del contenido de las clases teóricas, lo que permitirá descargar éstas de ciertos desarrollos matemáticos y otras cuestiones complementarias. Su principal objetivo es el de consolidar los conocimientos adquiridos en las clases de teoría. También se intentará aprovechar en las clases de problemas para tomar contacto con aplicaciones reales de la asignatura.

Se facilitará a los alumnos una lista de problemas para cada tema con la suficiente antelación para intentar la solución por sí mismo y poder participar de un modo más provechoso en las discusiones. En clase el profesor realizará alrededor de la mitad de los problemas propuestos, y los alumnos estarán encargados de intentar resolver el resto, haciendo uso provechoso de las tutorías.

Los problemas propuestos serán de tres tipos. En primer lugar están los que podemos denominar como "aplicaciones directas" de las expresiones teóricas. Son problemas con los que se pretende que el alumno afiance el conocimiento y adquiera habilidad y confianza en el manejo de las expresiones pertinentes. En segundo lugar, se proponen como problemas ciertas deducciones simples de resultados empleados o mencionados en las clases de teoría que se consideren demasiado específicas para tratarlas en detalle en las clases teóricas. Finalmente están los problemas que plantean aplicaciones de la teoría a sistemas/casos más cercanos a la realidad o que desarrollan conceptos importantes dentro de la materia. No habrá días específicos para hacer problemas, sino que se plantearán en el momento más pertinente para que sirvan de apoyo a las clases de teoría.

Realización de problemas

Una o dos veces a lo largo del curso, se propondrá la resolución de un problema a cada alumno o a cada grupo de 2 alumnos (dependiendo del número de alumnos matriculados). El alumno dispondrá de una semana para entregar al profesor el problema resuelto, y deberá explicar con claridad los pasos que ha seguido y por qué (esto se considerará más importante que una respuesta correcta sin explicación o motivación). Estos problemas les permitirá profundizar en algún tema concreto y les servirá de complemento a las clases de teoría y problemas. Este "trabajo para casa" contribuirá a una parte de la nota final.

Exposición de un trabajo

Los alumnos dispondrán de una extensa lista de posibles temas sobre los que realizar un trabajo. Una vez escogido el tema, el profesor proporcionará artículos de investigación y/o docencia a cada alumno sobre el tema que ha escogido. El alumno deberá leer en detalle y comprender esos trabajos, y elaborar una exposición para mostrar con el cañón proyector a sus compañeros, con quienes discutirá al final de la exposición. Se valorará la capacidad del alumno para captar la atención de sus compañeros y transmitir una idea concreta de manera clara y motivada, más que simplemente mostrar un resumen de lo que lea en el artículo. La exposición será obligatoria y también formará parte de la nota final de cada alumno.

Seminarios

La organización de seminarios monográficos puede ser un complemento útil en determinadas ocasiones. En principio es interesante escogerlos en conexión con los temas de investigación relacionados con la asignatura. Muchos de los temas de investigación que se llevan a cabo en el área de Física Atómica, Molecular y Nuclear del Departamento de Física Teórica, Atómica y Óptica de la UVa están relacionados con la Mecánica Cuántica. Los mismos profesores presentarán en un seminario en clase alguno de sus trabajos de investigación, si hay tiempo. Es conveniente también animar a los estudiantes a asistir a una parte del ciclo de seminarios organizado por el Departamento, impartidos por miembros de éste o por visitantes de otras Universidades o Centros de Investigación nacionales o extranjeros. En cualquier caso, se elegirán temas de interés actual. Esta actividad complementaria es importante también con vistas a desarrollar las competencias específicas E1, E10, E11.

Criterios y sistemas de evaluación

Combinación de evaluación continua con problemas y exámenes parciales, y examen final de problemas y cuestiones.

El procedimiento de evaluación detallado es:

- Examen final de problemas y teoría: 50% de la nota.
- Problemas para casa: 37.5% de la nota.
- Trabajo y presentación: 12.5% de la nota.

Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial

Las actividades de tutoría son muy beneficiosas para el alumno si son bien aprovechadas. El profesor estará disponible para realizar esta actividad, incluso fuera de las horas establecidas, en la medida de lo posible.

Con objeto de potenciar esta actividad, hemos implementado en el Campus Virtual de la UVa un curso virtual de Física Atómica. Este curso virtual contiene enlaces a diversa información relevante para la asignatura y constituye un buen recurso de aprendizaje, ya que permite al alumno estar en contacto fuera de las horas lectivas.

El profesor ha diseñado archivos en formato pdf (editados con LaTeX) que colgará en la página del curso virtual para que los alumnos puedan descargarlos con anterioridad a las clases presenciales. La idea es que los alumnos puedan echar un vistazo al fichero correspondiente a cada clase antes de la clase presencial, lo que ayudará a seguir mejor la asignatura. También podrá servirle como material de estudio.

La asignatura virtual de Física Atómica que hemos implementado en el Campus Virtual de la UVA dentro de la plataforma MOODLE, está estructurada en un apartado general y los distintos temas de la asignatura presencial. El alumno puede navegar y acceder a los diferentes recursos que he agregado y ordenado según estas etiquetas. En el momento de redactar este documento, el profesor no tiene aun decidido qué información adicional concreta o enlaces externos incluirá en el curso virtual, así que no puede proporcionar más información. Posiblemente se incluirán enlaces a temas de actualidad interesantes relacionados con la materia, o a sitios web útiles para la docencia de la asignatura, como sistemas de unidades, factores de conversión, etc.

Calendario y horario

La asignatura se cursa en el segundo cuatrimestre. El horario detallado se proporcionará al alumno por otras vías.

Tabla de Dedicación del Estudiante a la Asignatura/Plan de Trabajo

La asignatura tiene 6 ECTS, de los cuales 2.8 son créditos presenciales y están distribuidos de la forma siguiente: 1.2 corresponden a clases teóricas en aula (30 horas del alumno), 1.2 corresponden a clases de problemas en aula (30 horas del alumno), 0.2 para tutorías, seminarios y presentación de trabajos (5 horas del alumno) y 0.2 dedicados a sesiones de evaluación (5 horas del alumno). En cuanto a los 3.2 ECTS de trabajo personal del alumno (no presenciales), 2.8 son de estudio autónomo y resolución de problemas (70 horas) y 0.4 para preparación y redacción de trabajos y ejercicios (10 horas).

Quizá es conveniente recalcar que, tal y como está planteada la asignatura, las clases teóricas y de problemas no están bien diferenciadas, pues constantemente se resuelven ejemplos concretos para apoyar los razonamientos teóricos.

Responsable de la docencia (recomendable que se incluya información de contacto y breve CV en el que aparezcan sus líneas de investigación y alguna publicación relevante)

Profesor Responsable: Andrés Aguado Rodríguez.

Líneas de Investigación: Simulación computacional, propiedades nanométricas de la materia.

Idioma en que se imparte

Castellano
