



Ministerio de Cultura y Educación
 Universidad Nacional de San Luis
 Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales
 Departamento: Física
 Area: Area Unica - Física

(Programa del año 2022)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
FISICA ATOMICA Y MOLECULAR	LIC.EN FISICA	015/06	2022	2° cuatrimestre
FISICA ATOMICA Y MOLECULAR	PROF.EN FÍSICA	16/06	2022	2° cuatrimestre

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
RICCARDO, JOSE LUIS	Prof. Responsable	P.Tit. Exc	40 Hs
LINARES, DANIEL HUMBERTO	Prof. Colaborador	P.Asoc Exc	40 Hs
RICCARDO, JULIAN JOSE	Responsable de Práctico	A.1ra Simp	10 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
2 Hs	2 Hs	2 Hs	2 Hs	8 Hs

Tipificación	Periodo
B - Teoria con prácticas de aula y laboratorio	2° Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
08/08/2022	11/11/2022	14	112

IV - Fundamentación

Esta materia es el eslabón fundamental entre la física clásica y la física moderna. Es la materia que aporta los conocimientos necesarios sobre las ideas relativistas y cuánticas necesarios para abordar materias como: mecánica cuántica, mecánica estadística, física del estado sólido, etc.

Además, le aporta al alumno un panorama nuevo, amplio y profundo acerca de la naturaleza.

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

1) Conocer los elementos básicos de la teoría especial de la relatividad. Hacer crecer las habilidades del alumno para resolver problemas y además desarrollar una intuición relativista del comportamiento de la naturaleza. 2) Introducir al alumno a los experimentos e ideas que dieron origen a la mecánica cuántica. Discutir las principales diferencias con la teoría clásica. 3) Familiarizar al alumno con los elementos que servirán como puntos de partida para desarrollar la ecuación de Schrödinger. Abordar el concepto de operador y su uso. 4) Conseguir un manejo de la mecánica cuántica haciendo uso de potenciales sencillos. Determinar valores propios y medios de los observables de interés. 5) Usar los conocimientos adquiridos para obtener información y predecir comportamientos de sistemas atómicos y moleculares, explicando así espectros y reglas de selección.

VI - Contenidos

Bolilla 1: "Teoría Especial de la Relatividad" Breve reseña histórica. Pulsos de luz sobre un móvil y la relatividad de

la simultaneidad. El reloj de luz. Movimiento relativo

de observadores con relojes de luz: "La dilatación del tiempo". La contracción de la longitud como consecuencia de la dilatación del tiempo. Obtención de las transformaciones de Lorentz. Aplicaciones. Dinámica relativista. Derivación de la ecuación dinámica. El trabajo y la energía relativista. La equivalencia masa-energía y los principios de conservación. El trabajo de la fuerza de interacción partícula-partícula como variación de la masa en reposo: el caso particular de los nucleones y las energías de fusión y fisión.

Bolilla 2: "Radiación Térmica y Postulado de Planck"

Radiación Térmica. Teoría Clásica de la cavidad radiante. Teoría de Planck de la cavidad radiante. El postulado de Planck y sus implicaciones. Imagen de Planck del cuanto de energía radiante. Aplicaciones termométricas.

Bolilla 3: "Propiedades Corpusculares de la Radiación. El Fotón"

El efecto fotoeléctrico. Teoría cuántica del efecto fotoeléctrico de Einstein, "el fotón". El Efecto Compton. Naturaleza dual de la radiación electromagnética. Emisión de rayos X. Producción y aniquilación de pares. Sección eficaz para la absorción y dispersión de fotones. Los fotones y el electromagnetismo de Maxwell: interpretación estadística de Einstein.

Bolilla 4: "Propiedades Ondulatorias de las Partículas. El Postulado de de Broglie"

Ondas de Materia. Generalización del concepto de dualidad: "La dualidad onda-partícula". El microscopio de rayos gamma de Heisenberg y producto de incerteza. Derivación de las relaciones de incerteza a partir de las propiedades de las ondas y los postulados de Einstein - de Broglie. ¿Incertidumbre o Indeterminación? La Indeterminación como principio de la naturaleza. Consecuencias del Principio de Indeterminación.

Bolilla 5: "El Modelo de Atomo de Bohr"

Modelo de Thomson. Modelo de Rutherford. Inestabilidad del átomo nuclear. Espectros atómicos. Postulados de Bohr. Modelo atómico de Bohr. Corrección por masa nuclear finita. Discretización de la energía atómica. Orbitas permitidas. Interpretación de las reglas de cuantización y su relación con el principio de Luis de Broglie. El principio de correspondencia. Crítica a la teoría cuántica antigua.

Bolilla 6: "La Teoría de Schrödinger: Una Mecánica Cuántica"

La ecuación de Onda Electromagnética y la relación de dispersión la los fotones. El postulado de Einstein-de Broglie y la relación de dispersión para la partícula libre. Paralelismo entre partícula libre y onda plana. La función de onda plana, la relación de dispersión y la ecuación de Schrödinger para la partícula libre. El principio de superposición. Condición de linealidad y generalización para una función de energía potencial arbitraria. Interpretación de Max Born de la función de onda. La ecuación Schrödinger independiente del tiempo. El operador "Energía", y el concepto de operador. Los observables y sus operadores. Regla de obtención de los operadores. Ecuaciones propias, autofunciones y autovalores. Los valores medios y su interpretación estadística. Propiedades requeridas para las autofunciones. Cuantización de la energía en la teoría de Schrödinger. Medidas simultáneas de dos o más observables. Mención del teorema de Ehrenfest y la recuperación de la 2o ley de Newton. Comparación entre las teorías cuánticas antigua y moderna. Descripción de la construcción axiomática de la Mecánica Cuántica: Los Postulados.

Bolilla 7: "Potenciales Independientes del Tiempo"

POTENCIALES NO LIGANTES:

Potencial cero. Potencial constante. Potencial escalón ($E < V_0$), la reflexión estacionaria y la penetración en barrera. Potencial escalón ($E > V_0$) reflexión cuántica. Coeficientes de reflexión y transmisión. La barrera de potencial ($E < V_0$), efecto túnel. La doble barrera y el efecto túnel resonante. Modelo simple de decaimiento alfa. Aplicaciones.

POTENCIALES LIGANTES:

Potencial de pozo cuadrado infinito (Estados puros, normalización y ortogonalidad, estados mezcla, significado de los coeficientes de la mezcla, densidades dependientes del tiempo de estados "mezcla", cálculo del producto de incerteza). Potencial de pozo cuadrado semi-infinito (determinación numérica del espectro de energías). Potencial de pozo cuadrado finito. Modelo simple molécula de amoníaco. Oscilador armónico simple.

Bolilla 8: "Atomos con un electrón"

Ecuación de Schrödinger en 3D en coordenadas cartesianas. Separación de la ecuación independiente del tiempo. Ecuación en coordenadas polares esféricas y su separación. Solución de las ecuaciones. Autovalores, números cuánticos y degeneración. Autofunciones. Densidad de probabilidad. La cantidad de movimiento angular. Los operadores L^2 y L_z . Autovalores y autofunciones del momento angular. Relaciones de incerteza para el momento angular.

Bolilla 9: "El Spín electrónico"

Momentos magnéticos dipolares orbitales. El experimento de Stern-Gerlach y el saín del electrón. Interacción saín-orbita. Momento angular total. La energía de interacción spín-órbita y los niveles de energía del átomo del hidrógeno. Razones de transición y reglas de selección.

Bolilla 10: "Partículas Idénticas"

Descripción cuántica de las partículas idénticas. Funciones propias simétricas y antisimétricas. El principio de exclusión de

Pauli: enunciado débil y fuerte. Propiedades de las funciones simétricas y antisimétricas. Pozo cuadrado infinito con bosones. Pozo cuadrado infinito con fermiones.

Bolilla 11: "Átomos Multieletrónicos"

Estado Base y Excitaciones de Rayos X" El átomo de Helio y las fuerzas de intercambio. Las intuición de Hartree. La teoría de Hartree-Fock. Ecuaciones independientes y orbitales. Estado base de átomos multieletrónicos y la tabla periódica. Los espectros de líneas de rayos X.

Bolilla 12: "Átomos Multieletrónicos y Excitaciones Ópticas"

Átomos alcalinos. Átomos con varios electrones ópticamente activos. Acoplamiento LS. Niveles de energía del átomo de carbono. Átomos en presencia de campos magnéticos: Efecto Zeeman. Los átomos pesados y el acoplamiento JJ.

Bolilla 13: "Moléculas"

Enlaces iónicos. Enlaces covalentes. Orbitales moleculares. Combinación de orbitales para formar compuestos: Introducción al Método de Hückel. Espectros moleculares. Espectros rotacionales. Espectros vibro-rotacionales. Espectros electrónicos. Efecto Raman. Reglas de selección. Determinación del espín nuclear y características de simetría. Descripción del método LCAO para la construcción de orbitales moleculares.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

Trabajos Prácticos de aula:

- 1) Teoría especial de la relatividad.
- 2) Radiación de cuerpo negro.
- 3) Propiedades corpusculares de la radiación.
- 4) Propiedades ondulatorias de las partículas.
- 5) Ecuación de Schrödinger: potenciales independientes del tiempo.
- 6) El átomo de hidrógeno. Espín electrónico.
- 7) Átomos multieletrónicos.
- 8) La molécula.

Experimentos propuestos:

- 1) Radiación Térmica, Verificación de la ley de Stefan y Determinación de la constante de Stefan-Boltzman.
- 2) Efecto Fotoeléctrico y determinación de la constante de Planck.
- 3) Difracción de Electrones y determinación de la longitud onda asociada de de Broglie.
- 4) Espectroscopía y Espectrometría. Uso de tubos de descarga gaseosa y redes de difracción. Experiencia con un CD y las lámparas de alumbrado público.
- 5) El laser y la doble rendija. Tapando y destapando rendijas.
- 6) El polarizador y las explicaciones cuánticas y clásicas de la intensidad a la salida de un polarizador.
- 7) Interacción Espín-Órbita, observación del doblete del sodio y determinación sus respectivas longitudes de onda.
- 8) Espectroscopía bajo la acción de un campo magnético. Efecto Zeeman. Determinación del factor giromagnético g del electrón.
- 9) Observación de Trazas de Partículas Ionizantes en Cámara de Niebla.
- 10) Tipos de radiación y las barreras de cartón, aluminio y plomo. Uso del contador Geiger. Laboratorio virtual (uso de software):
 - 1) Potencial escalón.
 - 2) Barrera de potencial. Efecto Túnel.
 - 3) Pozo de potencial cuadrado finito.
 - 4) Modelo de molécula de amoníaco 1D.
 - 5) Oscilador armónico 1D.
 - 6) Armónicos esféricos. Orbitales atómicos.
 - 7) Orbitales en átomos multieletrónicos.
 - 8) Molécula. Enlaces y espectros.

VIII - Regimen de Aprobación

Regularización de la materia:

- 1) Asistir por lo menos al 70 % de las prácticas de aula.
- 2) Aprobación de 3 parciales con más de 70 %. El número total de recuperaciones será acorde a la reglamentación vigente de

la Facultad.

Aprobación de la materia:

Examen final con nota mayor que 4.

IX - Bibliografía Básica

- [1] [1] Introducción a la Teoría Especial de la Relatividad, Robert Resnick, Editorial Limusa (1977). Relatividad Especial, A. P. French, Editorial Reverté (1996).
- [2] [2] Física Cuántica. Átomos Moléculas, Sólidos, Núcleos y Partículas 2o Edición. Robert Eisberg y Robert Resnick,
- [3] [3] Editorial LIMUSA (1993) (Última 2002).
- [4] [4] Introducción a la Física Cuántica. A. P. French y E. F. Taylor. (Cursos introductorios del M.I.T.). Editorial Reverté
- [5] [5] (2003).
- [6] [6] Mecánica Cuántica 4o Edición. Alastair I. M. Rae. IoP Publishing Bristol and Philadelphia (2002).
- [7] [7] Fundamentos de Física Moderna. Robert Eisberg. Editorial Limusa (2002).
- [8] [8] Física Moderna. Paul Tipler. Worth Publishers, Inc. (Edición 2001).
- [9] [9] The Quantum World of Atoms and Molecules. J. P. Dahl. World Scientific Publisher (2001).
- [10] [10] Molecular Quantum Mechanics (4° Edition). P. Atkins and R. Friedman. Oxford University Press (2005).
- [11] [11] Física Vol. III. Fundamentos Estadísticos y Cuánticos. Marcelo Alonso y Edward J. Finn. Fondo Educativo
- [12] [12] Interamericano (2000).
- [13] [13] Física Cuántica Vol. 4. Cursos de Física de Berkeley. Eyvind H. Wichmann (1994).

X - Bibliografía Complementaria

- [1] [1] Mecánica Cuántica, Albert Messiah, John Wiley & Sons (1999).
- [2] [2] Theory and Application of Quantum Mechanics. Amnon Yariv. John Wiley & Sons (1982).
- [3] [3] Quantum Mechanics. Claude Cohen-Tanoudji, Bernard Diu and Frank Laloe. Willey & S. (1991).
- [4] [4] Quantum Mechanics. Ta-You Wu. World Scientific (1986).
- [5] [5] Mecánica Cuántica I. Ferrer, Massmann, Roessler y José Rogan. Departamento de Física, Facultad de Ciencias,
- [6] [6] Universidad de Chile.
- [7] [7] Visual Quantum Mechanics, Bernd Thaller, Springer-Verlag (2000).
- [8] [8] The Physical Principles of Quantum Mechanics. Werner Heisenberg, Dover Publications, Inc. (1930).
- [9] [9] The Mechanics of the Atom. Max Born, Frederik Ungar Publishing Co, New york (1960).
- [10] [10] Curso de Física Teórica Vol. 3, Mecánica Cuántica No Relativista. L. D. Landau y E. M. Lifshitz. Editorial Reverté
- [11] [11] (1981).
- [12] [12] ¿Qué es la teoría de la relatividad? L. Landau y Y. Rumer, Ediciones Akal S. A., 3o edición (1994).
- [13] [13] La Teoría de la Relatividad, Albert Einstein, ESSE Servicios Editoriales (2005).

XI - Resumen de Objetivos

- 1) Introducir al alumno a los experimentos e ideas que dieron origen a la mecánica cuántica.
- 2) Familiarizar al alumno con los elementos que servirán como puntos de partida para desarrollar la ecuación de Schrödinger.
- 3) Conseguir un manejo de la mecánica cuántica haciendo uso de potenciales sencillos.
- 4) Usar los conocimientos adquiridos para obtener información y predecir comportamientos de sistemas atómicos y moleculares.
- 5) Introducir las nociones básicas de la espectroscopía.

XII - Resumen del Programa

Tema 1: "Teoría Especial de la Relatividad"

Elementos básicos de la teoría de la relatividad.

Tema 2: "Radiación Térmica y Postulado de Planck"

Radiación Térmica. Teoría Clásica de la cavidad radiante. . Imagen de Planck del cuanto de energía radiante.

Tema 3: "Propiedades Corpusculares de la Radiación. El Fotón"

El efecto fotoeléctrico. El Efecto Compton. Emisión de rayos X. Producción y aniquilación de pares.

Tema 4: "Propiedades Ondulatorias de las Partículas. El Postulado de de Broglie"

Relaciones de Einstein-de Broglie. Ondas de Materia. Principio de incertidumbre.

Tema 5: "El Modelo de Atomo de Bohr"

Modelo de Thomson. Modelo de Rutherford. Modelo atómico de Bohr.

Tema 6: "La Teoría de Schrödinger: Una Mecánica Cuántica"

Principios de la mecánica cuántica. Ecuación de Schrödinger. Características generales de la teoría.

Tema 7: "Potenciales Independientes del Tiempo"

POTENCIALES NO LIGANTES:

Potencial escalón. Barrera de potencial.

POTENCIALES LIGANTES:

Potencial de pozo cuadrado infinito. Potencial de pozo cuadrado semi-infinito. Potencial de pozo cuadrado finito. Modelo simple molécula de amoníaco. Oscilador armónico simple.

Bolilla 8: "Átomos con un electrón"

Solución del potencial central de Coulomb. Átomo de hidrógeno

Bolilla 9: "El Spín electrónico"

Momentos magnéticos dipolares . El experimento de Stern-Gerlach y el saín del electrón. Interacción saín-orbita.

Bolilla 10: "Partículas Idénticas"

Descripción cuántica de las partículas idénticas. Funciones propias simétricas y antisimétricas. El principio de exclusión de Pauli: enunciado débil y fuerte. Fermiones y bosones.

Bolilla 11: "Átomos Multielectrónicos, Estado Base y Excitaciones de Rayos X"

El átomo de Helio y las fuerzas de intercambio. La teoría de Hartree-Fock. Los espectros de líneas de rayos X.

Bolilla 12: "Átomos Multielectrónicos y Excitaciones Ópticas"

Átomos alcalinos. Átomos con varios electrones ópticamente activos. Acoplamiento LS. Efecto Zeeman.

Bolilla 13: "Moléculas"

Enlaces iónicos. Enlaces covalentes. Orbitales moleculares. Espectros moleculares.

XIII - Imprevistos

XIV - Otros