



Guía Docente				
Datos Identificativos				2021/22
Asignatura (*)	Fundamentos de Cuántica	Código	610G04015	
Titulación				
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	1º cuatrimestre	Segundo	Obrigatoria	6
Idioma	CastelánGalegoInglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinación	García Dopico, María Victoria	Correo electrónico	victoria.gdopico@udc.es	
Profesorado	Fernandez Perez, María Isabel	Correo electrónico	isabel.fernandez.perez@udc.es	
	García Dopico, María Victoria		victoria.gdopico@udc.es	
Web	https://campusvirtual.udc.gal/course/view.php?id=15391			
Descrición xeral	<p>A química é unha disciplina que se encarga de estudar a materia, as súas propiedades, transformacións e a súa interacción coa radiación electromagnética e, este estudo implica ser capaz de describir o comportamento dos elementos básicos que compoñen a materia (electróns e núcleos atómicos). materia a nivel microscópico. E é ao que nos dedicaremos neste tema, a descubrir as leis da mecánica que nos permiten explicar o comportamento das partículas macroscópicas, xa que non obedecen ás leis da física clásica senón á mecánica cuántica pouco intuitiva. É esencial saber aplicar rigorosamente os seus principios para derivar as leis que rexen a materia, a súa estrutura, os tipos de enlaces e as súas transformacións e ver como teñen importantes consecuencias a nivel macroscópico. Unha vez que coñezamos as bases da mecánica cuántica, introduciremos os fundamentos da mecánica estatística que serve de ponte para calcular as propiedades macroscópicas da materia empregando a mecánica cuántica. Todos os conceptos destas novas mecánicas aplicaranse para simular e analizar as propiedades da materia a escala nanoscópica.</p>			
Plan de continxencia	<p>1. Modificacións en los contenidos No se realizarán cambios.</p> <p>2. Metodoloxías</p> <p>*Metodoloxías docentes que se manteñen</p> <p>-Traballos tutelados (computan na avaliación)</p> <p>*Metodoloxías docentes que se modifican</p> <p>- Sesión maxistral (pasan a ser virtuais por TEAMS)</p> <p>? Seminarios (pasan a ser virtuais por TEAMS)</p> <p>- Proba obxectiva (pasa a ser virtual TEAMS y campus virtual) (computa na avaliación)</p> <p>- Proba mixta (pasa a ser virtual TEAMS y Campus virtual) (computa na avaliación)</p> <p>3. Mecanismos de atención personalizada ao alumnado</p> <p>? Correo electrónico: diariamente, de uso para facer consultas, solicitar encontros virtuais para resolver dúbidas e facer o seguimento das actividades propostas.</p> <p>-Campus virtual: diariamente segundo a necesidade do alumnado.</p> <p>? Teams: igualmente para facer consultas, solicitar e levar a cabo encontros virtuais para resolver dúbidas e facer o seguimento das actividades propostas.</p> <p>4. Modificacións na avaliación Non se realizarán cambios.</p> <p>5. Modificacións da bibliografía ou webgrafía Non se realizarán cambios. Están a dispor materiais en campus virtual e/ou no correspondente Class Notebook (Office365) da asignatura.</p>			



Competencias do título

Código	Competencias do título
--------	------------------------

Resultados da aprendizaxe

Resultados de aprendizaxe	Competencias do título		
	A1	B2	C1
Coñecer os principios da mecánica cuántica	A2 A3 A7	B6 B8 B9 B11	C2 C3
Coñecer os principios da mecánica estatística	A1 A2 A3 A7	B1	C2
Aplicar os contidos teóricos adquiridos á explicación de fenómenos experimentais	A1 A2 A3 A7	B1 B2 B3 B4 B6 B7 B8	C1 C2 C3 C8
Saber aplicar os principios da mecánica cuántica para describir a estrutura e propiedades de átomos e moléculas	A1 A2 A3 A7	B1 B2 B3 B4 B5	C2 C3 C7 C9
Adquirir habilidades no manexo e busca de bibliografía relacionada cos contidos da materia.	A1 A2 A3 A7	B1 B2 B9 B12	C1 C2 C4 C8

Contidos

Temas	Subtemas
1. Introducción á Mecánica Cuántica: Postulados	<ul style="list-style-type: none"> Antecedentes históricos - Modelo Bohr - Dualidade onda-partícula - Elementos matemáticos - Postulados da Mecánica Cuántica - Ecuación de Schrödinger independente do tempo - Importancia dos postulados: principios de correspondencia, incerteza de Heisenberg e superposición de estados
2. Movemento de traslación: modelo da partícula nunha caixa	<ul style="list-style-type: none"> - A partícula libre - A partícula nunha caixa unidimensional: funcións de onda e niveis de enerxía. - A partícula nunha caixa de dous e tres dimensións: separación de variables e dexeneración. - Efecto túnel - Aplicacións da partícula nunha caixa. Pozos cuánticos, fios cuánticos e puntos cuánticos



3. Movemento de vibración: modelo do oscilador harmónico	<ul style="list-style-type: none">- Tratamento clásico do oscilador harmónico- Tratamento do oscilador cuántico: Funcións de onda: polinomios hermites.- Enerxía vibratoria: niveis de enerxía.- O oscilador harmónico como modelo da vibración das moléculas.- Anharmonicidade.
4. Movemento de rotación: modelo do rotor ríxido	<ul style="list-style-type: none">- Momento angular na mecánica clásica.- Momento angular en mecánica cuántica: Funcións de onda: polinomios de Legendre. Harmónicos esféricos.- O rotor ríxido de dúas partículas: enerxía rotacional: niveis de enerxía.- Cuantización do momento angular.
5. Átomos hidroxenoides	<ul style="list-style-type: none">- Resolución da ecuación de Schrodinger para o átomo de hidróxeno ou ión.- Separación de variables: funcións de onda radial e angular.- Niveis de enerxía.- Orbital atómico.- Función de distribución radial.- Funcións de onda reais: representación radial e angular.- Efecto Zeeman.
6. Métodos aproximados	<ul style="list-style-type: none">- Resolución da ecuación de Schrodinger en sistemas de interese químico- Método de perturbación.- Método de variacións: teorema de variación.- Funcións variacionais lineais: ecuacións seculares.- Aplicacións de métodos aproximados á química cuántica
7. Átomos polieletrónicos	<ul style="list-style-type: none">- Estudo do átomo de helio.- Orbitais Slater- Método de campo autoconsistente de Hartree-Fock- Momento angular de xiro.- Configuración electrónica- Antisimetría: principio de exclusión de Pauli.- Táboa periódica.- Momento angular orbital total: acoplamentos espín-órbita e jj- Regras de Hund- Espectroscopia atómica. Termos atómicos. Regras de selección.- Paramagnetismo atómico
8. O enlace químico. Introducción ó estudo das moléculas	<ul style="list-style-type: none">- O hamiltoniano molecular- Aproximación Born-Oppenheimer.- Teoría dos orbitais moleculares e teoría dos enlaces de valencia.- Aplicación do método orbital molecular ao ión da molécula de hidróxeno.- Orbitais moleculares: unión e anti-enlace.- Moléculas diatómicas homonucleares.- Moléculas diatómicas heteronucleares.- Enlace polar: electronegatividade
9. Métodos semiempíricos	<ul style="list-style-type: none">- Ab initio e métodos semiempíricos.Método Hartree-Fock. Conxuntos base. Correlación electrónica. Método de interacción de configuración. Métodos funcionais de densidade.- Aproximación pi-electrónica.- Método de electróns libres (FEMO).- Teoría orbital molecular aplicada a moléculas conxugadas e aromáticas: enfoque de Hückel.- Curvas de enerxía potencial



10. Fundamentos de Mecánica Estadística	<ul style="list-style-type: none"> - Fundamentos do método mecanoestadístico. - Bases da termodinámica estatística. - Estudo termodinámico estatístico de gases ideais. - Interpretación estatística das propiedades termodinámicas dos sólidos.
---	--

Planificación				
Metodoloxías / probas	Competencias	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais
Sesión maxistral	A1 A2 B1 B6 B9 C2 C3	32	50	82
Seminario	A1 A2 A3 A7 B1 B2 B3 B5 B7 B8 B9 C3 C2	16	36	52
Traballos tutelados	A1 A2 A3 A7 B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B11 B12 C1 C2 C3 C4 C7 C8 C9	0	10	10
Proba obxectiva	A1 A2 A3 A7 B1 B2 B3 B4 B6 B7 B8 B9 B12 C2 C3 C9	2	0	2
Proba mixta	A1 A2 A3 A7 B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 C1 C2 C3	3	0	3
Atención personalizada		1	0	1

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Sesión maxistral	<p>? Duración de aproximadamente unha hora e se impartirán no horario aprobado pola xunta do centro.</p> <p>? As clases serán do tipo lección maxistral nas que o/a profesor/a presentará os temas de la asignatura co apoio dos medios audiovisuales necesarios, indicando os/as alumnos/as o máis importante a ter en conta á hora do estudio e recomendándoles capítulos dos libros máis adecuados para a súa maior comprensión.</p> <p>? Incentivarase a participación do/a estudante nas clases, non obstante, nas clases de seminario e titorías, o/a alumno/a ten máis oportunidade para resolver todas aquelas dúbidas que lle tiveran xurdido durante o seu estudio.</p> <p>? O/a profesor/a facilitará o acceso dos/as estudantes a todo o material audiovisual utilizado nas clases, así como outro tipo de material complementario, para que lles sirva na súa aprendizaxe. O acceso os devanditos materiais será ben a través da Campus virtual da Universidade ou ben a través do servizo de reprografía do centro.</p>
Seminario	<p>?Actividade a desenvolver en grupos reducidos, onde resolveranse cuestións e problemas relacionados cos contidos da materia, con apoio e supervisión directa do profesor.</p> <p>?Plantearanse casos prácticos ou ben resolveranse dúbidas.</p>



Traballos tutelados	<p>?Actividades en grupo que pretenden promover a aprendizaxe autónoma dos estudantes, baixo a tutela do profesor.</p> <p>?Propóñeranse actividades relacionadas con contidos de interese da materia, que deben resolverse en grupo e explicarse posteriormente ao profesor nunha titoría presencial. Os grupos Terán unha capacidade máxima de 4 persoas</p> <p>Programa Green Campus - Facultade de Ciencias</p> <p>Para axudar a conseguir un esquema sostible inmediato dos traballos que se realizan nesta materia:</p> <p>a. Solicitaranse principalmente en formato virtual e soporte informático.</p> <p>b. Se se fai en papel:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Non se utilizarán plásticos. - Empregarase papel reciclado. - Evitarase a realización de borradores.
Proba obxectiva	<p>?Realizaráanse dúas probas curtas ao longo do cuadrimestre,</p> <ul style="list-style-type: none"> - Na primeira proba avalíarase a aprendizaxe asociada, aos fundamentos básicos de Mecánica Cuántica. - Na segunda proba avalíarase a aprendizaxe asociada á aplicación da Mecánica Cuántica a sistemas sinxelos. <p>?As probas poderán combinar preguntas de resposta múltiple e/ou de resposta breve.</p>
Proba mixta	<p>?Exame final de ata 3 horas de duración que terá preguntas curtas, de resposta múltiple e problemas. Avalíarase a aprendizaxe asociada a todos os contidos desenvolvidos na materia.</p> <p>?Realizarase nas datas aprobadas pola Xunta de Facultade do Centro.</p>

Atención personalizada

Metodoloxías	Descrición
Traballos tutelados	<p>?Resolveranse as dúbidas que poida ter o/a estudante en canto á teoría impartida nas leccións maxistrais, en resolución de problemas.</p> <p>?Igualmente orientarase o estudante, de xeito personalizado, na estratexia de estudo da asignatura.</p> <p>?As titorías, en grupo ou personais, realizaranse a través da aplicación TEAMS. Igualmente poderán realizarse empregando o campus virtual e/ou correo electrónico.</p> <p>?No caso dos traballos tutelados, cada grupo de estudantes deberá concertar unha titoría presencial co profesor correspondente para discutir a actividade non presencial proposta.</p>

Avaliación

Metodoloxías	Competencias	Descrición	Cualificación
Traballos tutelados	A1 A2 A3 A7 B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B11 B12 C1 C2 C3 C4 C7 C8 C9	<p>?Actividades en grupo que pretenden promover a aprendizaxe autónoma dos estudantes, baixo a tutela do profesor.</p> <p>?Propóñeranse actividades relacionadas con contidos de interese da materia, que deben resolverse en grupo e explicarse posteriormente ao profesor nunha titoría presencial. Os grupos Terán unha capacidade máxima de 4 persoas</p>	15
Proba mixta	A1 A2 A3 A7 B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 C1 C2 C3	<p>?Exame final de ata 3 horas de duración que terá preguntas curtas, de resposta múltiple e problemas. Avalíarase a aprendizaxe asociada a todos os contidos desenvolvidos na materia.</p> <p>?Realizarase nas datas aprobadas pola Xunta de Facultade do Centro.</p>	60
Proba obxectiva	A1 A2 A3 A7 B1 B2 B3 B4 B6 B7 B8 B9 B12 C2 C3 C9	<p>?Realizaráanse dúas probas curtas ao longo do cuadrimestre,</p> <ul style="list-style-type: none"> - Na primeira proba avalíarase a aprendizaxe asociada, aos fundamentos básicos de Mecánica Cuántica. - Na segunda proba avalíarase a aprendizaxe asociada á aplicación da Mecánica Cuántica a sistemas sinxelos. <p>?As probas poderán combinar preguntas de resposta múltiple e/ou de resposta breve.</p>	25



Observacións avaliación

Requisitos para aprobar a materia:-

Para superar a materia é necesario acadar unha cualificación mínima de 4 (sobre un máximo de 10) nas probas obxectiva e mixta e a cualificación final, considerando tódalas metodoloxías de avaliación, ser igual ou superior a 5 (sobre un máximo de 10).-

De non ter acadada a cualificación mínima de 4 nas probas anteriores, a materia figurará como suspensa, aínda que a media das calificacións obtidas nas distintas metodoloxías sexa superior a 5 (sobre un máximo de 10), en cuxo caso a cualificación final outorgada será de 4.5. Cualificación "non presentado":-

Cualquier estudante que realice actividades avaliadas considerase como presentado sempre e cando as mesmas representen máis do cuarenta por cento da nota global. Segunda oportunidade:-

A segunda oportunidade de xullo enténdese como unha segunda oportunidade de realización da proba mixta final.

Consecuentemente, mantéñense as cualificacións das probas obxectivas e dos traballos tutelados obtidas ao longo do curso, mentres que a cualificación da proba mixta da segunda oportunidade substituirá a obtida na proba mixta da primeira oportunidade. Outras consideracións-

Durante a realización das probas obxectiva e mixta, en calquera de ambas oportunidades, agás que se indique o contrario, está prohibido o uso de calquer dispositivo con acceso a Internet. Pese a que non se aconsella traer ditos dispositivos á devandita actividade, poderán habilitarse un espazo para o seu almacenamento, sen que elo implique ningún tipo de responsabilidade por parte da UDC, da Facultade ou dos profesores presentes durante a proba obxectiva. Se durante a realización da proba obxectiva, hai indicios do uso de dispositivos, automaticamente o/a estudante será expulsado do aula, a proba obxectiva cualificada con suspenso e se informará por escrito á dirección do centro segundo establece a normativa correspondente. O alumnado con recoñecemento de dedicación a tempo parcial e dispensa académica de exención de asistencia, segundo establece a "NORMA QUE REGULA O RÉXIME DE DEDICACIÓN AO ESTUDO DOS ESTUDANTES DE GRAO NA UDC (Arts. 2.3; 3.b; 4.3 e 7.5) (04/05/2017) poderá realizar as probas obxectivas, sempre e cando os profesores sexan debidamente informados ao principio do curso. Sen menoscabo do anterior, os profesores poderán encargarlle a este alumnado diferentes traballos/problemas ó longo do curso para ser expostos en horario de titorías.

Fontes de información

Bibliografía básica

· ENGEL, T; REID, P. (2006). QUÍMICA FÍSICA. Pearson Addison Wesley. ENGEL, T REID, P. (2019). PHYSICAL CHEMISTRY, QUANTUM CHEMISTRY AND SPECTROSCOPY. Pearson Education. ATKINS, P.W. (2008). QUÍMICA FÍSICA. Panamericana. ATKINS, P.W., JULIO DE PAULA, JAMES KEELER (2018). PHYSICAL CHEMISTRY. Oxford University Press. McQUARRIE (1997). PHYSICAL CHEMISTRY. University Science Books. Vladimir V. Mitin, Dmitry I. Sementsov, Nizami Z. Vagidov, (2010) Quantum Mechanics for Nanostructures, Cambridge University Press. P. W. Atkins, R. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, 5th Ed., Oxford, 2010

Bibliografía complementaria

· LOWE (2006). QUANTUM CHEMISTRY 3ª Ed.. Elsevier. RAFF, L.M. (2001). PRINCIPLES OF PHYSICAL CHEMISTRY. Prentice Hall. HERNANDO, J. M. (1974). PROBLEMAS DE QUÍMICA FÍSICA. Gráficas Andrés Martín. McQUARRIE (2008). QUANTUM CHEMISTRY. University Science Books. LEVINE, I.N. (2001). QUÍMICA CUÁNTICA 5ª ed. Prentice Hall. LEVINE, I.N. (2004). FISCOQUÍMICA 5ª edición. McGraw-Hill. James R. Chelikowsky, (2019) Introductory Quantum Mechanims with MatLab, Wiley. Cruz, Chamizo, Garritz, (1987), Estructura atómica, Addison Wesley iberoamericana



Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Electricidade e Magnetismo/610G04007
Fundamentos de Matemáticas/610G04001
Ampliación de Cálculo/610G04009
Química: Enlace e Estrutura/610G04005
Mecánica e Ondas/610G04002

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Materias que continúan o temario

Nanociencia e Nanotecnoloxía Computacional/610G04034
Computación Cuántica/610G04035
Estado Sólido/610G04022
Espectroscopía/610G04017

Observacións

Recoméndase o/a estudante repasa-los conceptos teóricos introducidos nas clases de teoría mediante a resolución de cuestións e exercicios propostos que figuran o final de cada tema nos libros recomendados. Desaconséllase estudar ÚNICAMENTE polos apuntes de clase que NUNCA deben substituír á consulta de calquera dos libros recomendados. Pode resultar moi ÚTIL empregar as horas de tutoría para clarear as dúbidas e profundizar nos coñecementos asociados á asignatura. Programa Green Campus - Facultade de Ciencias Para axudar a conseguir un esquema sostible inmediato os traballos / documentos / exames que se realizan nesta materia: a. Solicítanse principalmente en formato virtual e soporte informático. b. Se se fai en papel: - Non se utilizarán plásticos. - Empregarase papel reciclado. - Evitarase a realización de borradores.

(*A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías