UNIVERSIDADE DA CORUÑA

Guía Docente				
Datos Identificativos				2022/23
Asignatura (*)	Fundamentos de Cuántica		Código	610G04015
Titulación				
Descriptores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	1º cuadrimestre	Segundo	Obrigatoria	6
Idioma	CastelánGalegoInglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinación	Garcia Dopico, Maria Victoria	Correo electrónico	victoria.gdopico@udc.es	
Profesorado	Fernandez Perez, Maria Isabel Garcia Dopico, Maria Victoria	Correo electrónico	isabel.fernandez.perez@udc.es victoria.gdopico@udc.es	
Web	https://campusvirtual.udc.gal/course/view.php?id=15391			
Descrición xeral	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) 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 microscópicas, 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.			

Competencias / Resultados do título	
Código	Competencias / Resultados do título

Resultados da aprendizaxe			
Resultados de aprendizaxe	Competencias / Resultados do título		
Coñecer os principios da mecánica cuántica	A1 A2 A3 A7	B2 B6 B8 B9 B11	C1 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	- Antecedentes históricos - Postulados da Mecánica Cuántica - Ecuación de Schröndinger 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	- 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, fíos cuánticos e puntos cuánticos
3. Movemento de vibración: modelo do oscilador harmónico	- 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	- 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	- Resolución da ecuación de Schrödinger para o átomo de hidróxeno ou ión. - 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	- Resolución da ecuación de Schrondinger 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 polielectrónicos	- Estudo do átomo de helio. - Orbitais Slater - Método de campo autoconsistente de Hartrree-Fock - Momento angular de xiro. - Configuración electrónica - Antisimetría: principio de exclusión de Pauli. - Táboa periódica. - Momento angular orbital total: acoplamientos 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	- 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	- 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.
10. Fundamentos de Mecánica Estadística	- 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 / Resultados	Horas lectivas (presenciais e virtuais)	Horas 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 C2 C3	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	12	12
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	? Duración de aproximadamente unha hora e se impartirán no horario aprobado pola xunta do centro. ? 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 compresión. ? 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. ? 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 aprendizase. O acceso os devanditos materiais será ben a través da Campus virtual da Universidade ou ben a través do servicio de reprografía do centro.
Seminario	?Actividade a desenvolver en grupos reducidos, onde resolveranse cuestións e problemas relacionados cos contidos da materia, con apoio e supervisión directa do profesor. ?Plantearanse casos prácticos ou ben resolveranse dúbidas.
Traballos tutelados	?Actividades en grupo que pretenden promover a aprendizaxe autónoma dos estudantes, baixo a tutela do profesor. ?Propóñerase actividades relacionadas con contidos de interés da materia. Os grupos terán unha capacidade máxima de 4 persoas Programa Green Campus - Facultade de Ciencias Para axudar a conseguir un esquema sostible inmediato dos traballos que se realizan nesta materia: a. Solicitaranse 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.
Proba mixta	?Exame final de ata 3-4 horas de duración que terá preguntas curtas, de resposta múltiple e problemas. Avalíarase a aprendizaxe asociada a todos os contidos desenvolvidos na materia. ?Realizarase nas datas aprobadas pola Xunta de Facultade do Centro.

Atención personalizada	
Metodoloxías	**Descrición**
Traballos tutelados	?Resolveranse as dúbidas que poida ter o/a estudante en canto á teoría impartida nas leccións maxistrales, en resolución de problemas. ?Igualmente orientarase o estudante, de xeito persoalizado, na estratexia de estudo da asignatura. ?As titorías, en grupo ou personais, realizaranse no despacho das profesoras e/ou a través da aplicación TEAMS. Igualmente poderán realizarse empregando o campus virtual e/ou correo electrónico. ?No caso dos traballos tutelados, cada grupo de estudantes deberá concertar unha titoría presencial coas profesoras para discutir a actividade non presencial proposta.

Avaliación			
Metodoloxías	**Competencias / Resultados**	**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	?Actividades en grupo que pretenden promover a aprendizaxe autónoma dos estudantes, baixo a tutela do profesor. ?Propóñerase actividades relacionadas con contidos de interés da materia. ?Os grupos terán unha capacidade máxima de 4 persoas ? O traballo implica: o Presentación oral onde se evaluará: 1.- Calidade da información contida na presentación. 2.- Habilidades amosadas na presentación, aptitudes de comunicación. 3.- Capacidade para defende-lo traballo presentado: obxetivo, ideas, desenrolo e argumentos. 4.- Presentación: claridade na exposición, vocabulario adecuado e coidado da ortografía 5.- Resposta/defensa das preguntas platexadas durante a exposición o Informe do traballo que inclúe a análise crítica dos resultados	20
Proba mixta	A1 A2 A3 A7 B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 C1 C2 C3	?Exame final de ata 3-4 horas de duración que constará de duas partes: unha de corte (50%) que inclúe preguntas de resposta breve, tipo test e/ou de ensaio; e outra de solución de problemas (50%) na que evaluará-se a habilidade na aplicación dos contidos teóricos para a resolución de problemas numéricos. ? Terá lugar nas datas aprobadas por la Junta de Profesorado del Centro.	80

Observacións avaliación

Requisitos para aprobar a materia:-
Para superar a materia é necesario acadar unha
cualificación mínima de 4 (sobre un máximo de 10) en cada unha das partes da proba mixta. A misma calificación mínima será exixida para os traballos tutelados.- En calquera das dúas oportunidades de non alcanzarse a cualificación mínima de 4 nas probas anteriores, a materia figurará como suspensa, aínda que a media obtida coas distintas metodoloxías sexa superior a 5 (sobre un máximo de 10). Neste caso a cualificación final outorgada será de 4 (sobre 10).Cualificación "non presentado":Cualquer estudante que realice actividades avaliables considérase como presentado sempre e cando as mesmas representen máis do cuarenta por cento da nota global Segunda oportunidade: A segunda oportunidade en xullo enténdese como una segunda oportunidade de realización da proba mixta final. Consecuentemente, mantéñense as cualificacións obtidas do traballo tutelado, mentres que a cualificación da proba mixta da segunda oportunidade substituirá a obtida na proba mixta da primeira oportunidade. É dicir os traballos tutelados non serán evaluados de novo na segunda oportunidade ? Sucesivos cursos académicos: O proceso de ensinanza-aprendizaxe, incluida a avaliación, refírese a un curso académico, e polo tanto volta a comenzar de cero co novo curso, é dicir ningunha das cualificacións obtidas durante un curso académico manteránse para o seguinte. ? Matrícula de honra: No caso de que haxa varios estudantes, con idéntica cualificación numérica, que poidan optar á matrícula de honra, se lles convocará a unha proba escrita sempre e cando o número de matrículas as que se poida optar sexa inferior ó de estudantes na devandita situación. Compre sinalar que na segunda oportunidade podera-se optar á matrícula de honra si o número máximo de éstas non se ten cuberto en sua totalidade na primera oportunidade?Alumnado con recoñecemento de adicación a tempo parcial e dispensa académica de exención de asistencia: É necesario que o alumnado informe as profesoras ó principio do curso da sua situación. Son de aplicación, para ámbalas duas oportunidades, os anteriores criterios de avaliación ? Plaxio e fraude na realización de tarefas e/ou probas. Será de aplicación o recollido na normativa da Universidade da Coruña no Artigo 14 das ?Normas de avaliación, revisión e reclamación das cualificacións dos estudis de grao e máster universitario (CG 19/12/2013, modificado polo CG 30/04/2014, polo CG 24/07/2014, polo CG 29/01/2015, CG 28/09/2016 e CG 29/06/2017Durante a realización das proba 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, poderá 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 deses 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.

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, Cambrige 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). QUIMICA CUÁNTICA 5ª ed. Prentice Hall· LEVINE, I.N. (2004). FISICOQUÍIMICA 5ª edición. McGraw-Hill· James R. Chelikowsky, (2019) Introductory Quantum Mechanims with MatLab, Wiley· Cruz, Chamizo, Garritz, (1987), Estructura atómica, Addisson 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 estudiante 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 estudiar ÚNICAMENTE polos apuntes de clase que NUNCA deben substituir á consulta de cualquera dos libros recomendados.Pode resultar moi ÚTIL empregar as horas de titoría para clarexar as dúbidas e profundizar nos coñecementos asociados á asignatura. Programa Green Campus - Facultade de CienciasPara axudar a conseguir un esquema sostible inmediato os traballos / documentos /exames que se realizan nesta materia:a. Solicitaranse 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