



Guía Docente				
Datos Identificativos				2023/24
Asignatura (*)	Fundamentos de Cuántica		Código	610G04015
Titulación	Grao en Nanociencia e Nanotecnoloxía			
Descriptores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	1º cuatrimestre	Segundo	Obrigatoria	6
Idioma	Castelán Galego Inglés			
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	<a href="https://campusvirtual.udc.gal/course/view.php?id=15391">https://campusvirtual.udc.gal/course/view.php?id=15391</a>			
Descripción 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 componen 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.</p> <p>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 estadística que serve de ponte para calcular as propiedades macroscópicas da materia empregando a mecánica cuántica.</p> <p>Todos os conceptos destas novas mecánicas aplicaranse para simular e analizar as propiedades da materia a escala nanoscópica.</p>			

Competencias do título	
Código	Competencias do título
A1	CE1 - Comprender los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales relacionados con la Nanociencia y Nanotecnología.
A2	CE2 - Aplicar los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales relacionados con la Nanociencia y Nanotecnología a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa.
A3	CE3 - Reconocer y analizar problemas físicos, químicos, matemáticos, biológicos en el ámbito de la Nanociencia y Nanotecnología, así como plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo el uso de fuentes bibliográficas.
A7	CE7 - Interpretar los datos obtenidos mediante medidas experimentales y simulaciones, incluyendo el uso de herramientas informáticas, identificar su significado y relacionarlos con las teorías químicas, físicas o biológicas apropiadas.
B1	CB1 - Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio
B2	CB2 - Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio
B3	CB3 - Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética
B4	CB4 - Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado
B5	CB5 - Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía
B6	CG1 - Aprender a aprender
B7	CG2 - Resolver problemas de forma efectiva.



B8	CG3 - Aplicar un pensamiento crítico, lógico y creativo.
B9	CG4 - Trabajar de forma autónoma con iniciativa.
B11	CG6 - Comportarse con ética y responsabilidad social como ciudadano/a y como profesional.
B12	CG7 - Comunicarse de manera efectiva en un entorno de trabajo.
C1	CT1 - Expresarse correctamente, tanto de forma oral como escrita, en las lenguas oficiales de la comunidad autónoma
C2	CT2 - Dominar la expresión y la comprensión de forma oral y escrita de un idioma extranjero
C3	CT3 - Utilizar las herramientas básicas de las tecnologías de la información y las comunicaciones (TIC) necesarias para el ejercicio de su profesión y para el aprendizaje a lo largo de su vida
C4	CT4 - Desarrollarse para el ejercicio de una ciudadanía respetuosa con la cultura democrática, los derechos humanos y la perspectiva de género
C7	CT7 - Desarrollar la capacidad de trabajar en equipos interdisciplinares o transdisciplinares, para ofrecer propuestas que contribuyan a un desarrollo sostenible ambiental, económico, político y social.
C8	CT8 - Valorar la importancia que tiene la investigación, la innovación y el desarrollo tecnológico en el avance socioeconómico y cultural de la sociedad
C9	CT9 - Tener la capacidad de gestionar tiempos y recursos: desarrollar planes, priorizar actividades, identificar las críticas, establecer plazos y cumplirlos

## Resultados da aprendizaxe

Resultados de aprendizaxe	Competencias do título		
Coñecer os principios da mecánica cuántica	A1 A2 A3 A7	B2 B6 B8 B9	C1 C2 C3 B11
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  B6 B7 B8	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  B5	B1 B2 B3 B4	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"><li>- Antecedentes históricos</li><li>- Postulados da Mecánica Cuántica</li><li>- Ecuación de Schrödinger independente do tempo</li><li>- Importancia dos postulados: principios de correspondencia, incerteza de Heisenberg e superposición de estados</li></ul>
2. Movimento de traslación: modelo da partícula nunha caixa	<ul style="list-style-type: none"><li>- A partícula libre</li><li>- A partícula nunha caixa unidimensional: funcións de onda e niveis de enerxía.</li><li>- A partícula nunha caixa de dous e tres dimensións: separación de variables e dexeneración.</li><li>- Efecto túnel</li><li>- Aplicacións da partícula nunha caixa. Pozos cuánticos, fíos cuánticos e puntos cuánticos</li></ul>
3. Movimento de vibración: modelo do oscilador harmónico	<ul style="list-style-type: none"><li>- Tratamento clásico do oscilador harmónico</li><li>- Tratamento do oscilador cuántico: Funcións de onda: polinomios hermites.</li><li>- Enerxía vibratoria: niveis de enerxía.</li><li>- O oscilador harmónico como modelo da vibración das moléculas.</li><li>- Anharmonicidade.</li></ul>
4. Movimento de rotación: modelo do rotor ríxido	<ul style="list-style-type: none"><li>- Momento angular na mecánica clásica.</li><li>- Momento angular en mecánica cuántica: Funcións de onda: polinomios de Legendre. Harmónicos esféricos.</li><li>- O rotor ríxido de dúas partículas: enerxía rotacional: niveis de enerxía.</li><li>- Cuantización do momento angular.</li></ul>
5. Átomos hidroxenoides	<ul style="list-style-type: none"><li>- Resolución da ecuación de Schrödinger para o átomo de hidróxeno ou ión.</li><li>- Funcións de onda radial e angular.</li><li>- Niveis de enerxía.</li><li>- Orbital atómico.</li><li>- Función de distribución radial.</li><li>- Funcións de onda reais: representación radial e angular.</li><li>- Efecto Zeeman.</li></ul>
6. Métodos aproximados	<ul style="list-style-type: none"><li>- Resolución da ecuación de Schrödinger en sistemas de interese químico</li><li>- Método de perturbación.</li><li>- Método de variacións: teorema de variación.</li><li>- Funcións variacionais lineais: ecuacións seculares.</li><li>- Aplicacións de métodos aproximados á química cuántica</li></ul>
7. Átomos polielectrónicos	<ul style="list-style-type: none"><li>- Estudo do átomo de helio.</li><li>- Orbitais Slater</li><li>- Método de campo autoconsistente de Hartree-Fock</li><li>- Momento angular de xiro.</li><li>- Configuración electrónica</li><li>- Antisimetría: principio de exclusión de Pauli.</li><li>- Táboa periódica.</li><li>- Momento angular orbital total: acoplamentos espín-órbita e jj</li><li>- Regras de Hund</li><li>- Espectroscopia atómica. Termos atómicos. Regras de selección.</li><li>- Paramagnetismo atómico</li></ul>



8. O enlace químico. Introducción ó estudo das moléculas	<ul style="list-style-type: none"><li>- O hamiltoniano molecular</li><li>- Aproximación Born-Oppenheimer.</li><li>- Teoría dos orbitais moleculares e teoría dos enlaces de valencia.</li><li>- Aplicación do método orbital molecular ao ión da molécula de hidróxeno.</li><li>- Orbitais moleculares: unión e anti-enlace.</li><li>- Moléculas diatómicas homonucleares.</li><li>- Moléculas diatómicas heteronucleares.</li><li>- Enlace polar: electronegatividade</li></ul>
9. Métodos semiempíricos	<ul style="list-style-type: none"><li>- Ab initio e métodos semiempíricos.</li><li>Método Hartree-Fock. Conxuntos base. Correlación electrónica. Método de interacción de configuración. Métodos funcionais de densidade.</li><li>- Aproximación pi-electrónica.</li><li>- Método de electróns libres (FEMO).</li><li>- Teoría orbital molecular aplicada a moléculas conxugadas e aromáticas: enfoque de Hückel.</li></ul>
10. Fundamentos de Mecánica Estadística	<ul style="list-style-type: none"><li>- Fundamentos do método mecanoestadístico.</li><li>- Bases da termodinámica estatística.</li><li>- Estudo termodinámico estatístico de gases ideais.</li><li>- Interpretación estatística das propiedades termodinámicas dos sólidos.</li></ul>

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 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	Descripción
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 da asignatura co apoio dos medios audiovisuales necesarios, indicando os/as alumnos/as o más importante a ter en conta á hora do estudio e recomendándoles capítulos dos libros más adecuados para a súa maior compresión.</p> <p>? Incentivarase a participación do/a estudiante nas clases, non obstante, nas clases de seminario e titorías, o/a alumno/a ten máis oportunidade para resolver todas aquellas dúbidas que lle tiveran xurdido durante o seu estudio.</p> <p>? O/a profesor/a facilitará o acceso dos/as estudiantes 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 servicio de reprografía do centro.</p>



Seminario	?Actividade a desenvolver en grupos reducidos, onde resloveranse cuestiós e problemas relacionados cos contidos da materia, con apoio e supervisión directa do profesor. ?Plantearanse casos prácticos ou ben resloveranse dúbidas.
Traballos tutelados	?Actividades en grupo que pretenden promover a aprendizaxe autónoma dos estudiantes, baixo a tutela do profesor. ?Propónerase 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. - Evitarse a realización de borradores.
Proba mixta	?Exame final de ata 3-4 horas de duración que terá preguntas curtas, de resposta múltiple e problemas. Avaliarase a aprendizaxe asociada a todos os contidos desenvolvidos na materia. ?Realizarase nas datas aprobadas pola Xunta de Facultade do Centro.

#### Atención personalizada

Metodoloxías	Descripción
Traballos tutelados	?Resolveranse as dúbidas que poida ter o/a estudiante en canto á teoría impartida nas leccións maxistrales, en resolución de problemas. ?Igualmente orientarase o estudiante, 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 estudiantes deberá concertar unha titoría presencial coas profesoras para discutir a actividade non presencial proposta.

#### Avaliación

Metodoloxías	Competencias	Descripción	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 estudiantes, baixo a tutela do profesor.  ?Propónerase 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: obxectivo, ideas, desenrollo e argumentos. 4.- Presentación: claridade na exposición, vocabulario adecuado e coidado da ortografía 5.- Resposta/defensa das preguntas planteadas durante a exposición  o Informe do traballo que inclúe a análise crítica dos resultados	10
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.	90

## 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.-

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": Cualquier estudiante 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, incluída 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 estudiantes, 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 estudiantes 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 estudios 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 29/06/2017). 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, 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 estudiante será expulsado do aula, a proba obxectiva cualificada con suspenso e se informará por escrito á dirección do centro segundo establece a normativa correspondente. Artigo 11, apartado 4 b), do Regulamento disciplinar do estudiantado da UDC: Cualificación de suspenso na convocatoria en que se cometía a falta e respecto da materia en que se cometía: o/a estudiante será cualificado con ?suspenso? (nota numérica 0) na convocatoria correspondente do curso académico, tanto se a comisión da falta se produxe na primeira oportunidade como na segunda. Para isto, procederase a modificar a súa cualificación na acta de primeira oportunidade, se fose necesario. Segundo se recolle nas distintas normativas de aplicación para a docencia universitaria se incorpora a perspectiva de xénero nesta materia.

## 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). FISICOQUÍMICA 5ª edición. McGraw-Hill· James R. Chelikowsky, (2019) Introductory Quantum Mechanisms 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 estudiante repasa-los conceptos teóricos introducidos nas clases de teoría mediante a resolución de cuestiós 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 tutoría para clarexar 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. Solicitarse 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