



Teaching Guide

Identifying Data					2023/24
Subject (*)	Fundamentals of Quantum Theory		Code	610G04015	
Study programme	Grao en Nanociencia e Nanotecnoloxía				
Descriptors					
Cycle	Period	Year	Type	Credits	
Graduate	1st four-month period	Second	Obligatory	6	
Language	SpanishGalicianEnglish				
Teaching method	Face-to-face				
Prerequisites					
Department	Química				
Coordinador	Garcia Dopico, Maria Victoria	E-mail	victoria.gdopico@udc.es		
Lecturers	Fernandez Perez, Maria Isabel Garcia Dopico, Maria Victoria	E-mail	isabel.fernandez.perez@udc.es victoria.gdopico@udc.es		
Web	https://campusvirtual.udc.gal/course/view.php?id=15391				
General description	<p>Chemistry is a discipline that is responsible for studying matter, its properties, transformations and its interaction with electromagnetic radiation and, this study, involves being able to describe the behavior of the basic elements that constitute matter (electrons and atomic nuclei), that is, the knowledge of matter at the microscopic level. And it is what we will dedicate ourselves to in this subject, to study the laws of mechanics that allow us to explain the behavior of microscopic particles, since they do not obey the laws of classical physics but the unintuitive quantum mechanics.</p> <p>It is essential to know how to rigorously apply its principles to derive the laws that govern matter, its structure, the types of bonds and its transformations, and to see how they have important consequences at the macroscopic level. Once we know the basics of quantum mechanics, we will introduce the foundations of statistical mechanics that serves as a bridge to calculate the macroscopic properties of matter using quantum mechanics.</p> <p>All the concepts of these new mechanics will be applied to simulate and analyze the properties of matter at the nanoscopic scale.</p>				

Study programme competences

Code	Study programme competences
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

Learning outcomes			
Learning outcomes	Study programme competences		
	A1	B2	C1
Know the principles of quantum mechanics	A2	B6	C2
	A3	B8	C3
	A7	B9	
		B11	
Know the principles of statistical mechanics	A1	B1	C2
	A2		
	A3		
	A7		
Apply the theoretical contents acquired to the explanation of experimental phenomena	A1	B1	C1
	A2	B2	C2
	A3	B3	C3
	A7	B4	C8
		B6	
		B7	
	B8		
Know how to apply the principles of quantum mechanics to describe the structure and properties of atoms and molecules.	A1	B1	C2
	A2	B2	C3
	A3	B3	C7
	A7	B4	C9
		B5	
Skills in the management and search of bibliography related to the contents of the subject.	A1	B1	C1
	A2	B2	C2
	A3	B9	C4
	A7	B12	C8

Contents	
Topic	Sub-topic



Introduction to Quantum Mechanics: Postulates	<ul style="list-style-type: none">- Historical background.- Postulates of Quantum Mechanics.- Time-independent Schrödinger equation.- Importance of postulates: principles of correspondence, Heisenberg uncertainty and superposition of states
Translational motion: model of the particle in a box.	<ul style="list-style-type: none">- Free particle.- The particle in a one-dimensional box: Wave functions and energy levels.- The particle in a two- and three-dimensional box: Separation of variables and degeneration.- Tunnel effect.- Applications of the particle in a box. Quantum wells, quantum wires and quantum dots
Vibrational motion: harmonic oscillator model	<ul style="list-style-type: none">- Classic treatment of the harmonic oscillator.- Quantum oscillator treatment: Wave functions: Hermite polynomials.- Vibration energy: energy levels.- The harmonic oscillator as a model of vibration of molecules.- Anharmonicity
Rotational motion: rigid rotor model.	<ul style="list-style-type: none">- Angular momentum in classical mechanics.- Angular momentum in quantum mechanics: Wave functions: Legendre polynomials. Spherical harmonics.- The rigid two-particle rotor: Rotational energy: energy levels.- Quantization of angular momentum.
Hydrogenoid atoms	<ul style="list-style-type: none">- Resolution of the Schrodinger equation for the hydrogen atom or ion.- Radial and angular wave functions.- Energy levels.- Atomic orbital.- Radial distribution function.- Real wave functions: radial and angular representation.- Zeeman effect.
Approximation methods	<ul style="list-style-type: none">- Schrodinger equation solving in systems of chemical interest.- Perturbation method.- Method of variations: variational theorem.- Linear variational functions: secular equations.- Applications of approximate methods to quantum chemistry
Multielectron atoms	<ul style="list-style-type: none">- Study of the helium atom.- Slater orbitals.- Hartree-Fock self-consistent field method.- Spin angular momentum.- Antisymmetry: Pauli's exclusion principle.- Periodic Table.- Electronic configuration.- Total orbital angular momentum: spin-orbit and jj couplings.- Hund's Rules.- Atomic spectroscopy. Atomic terms. Selection rules.- Atomic paramagnetism



Chemical bond. Introduction to the study of molecules.	<ul style="list-style-type: none"> - The molecular Hamiltonian. - Born-Oppenheimer approximation. - Molecular orbital theory and valence bond theory. - Application of the molecular orbital method to the hydrogen molecule ion. - Molecular orbitals: bonding and antibonding. - Homonuclear diatomic molecules. - Heteronuclear diatomic molecules. - Polar bond: electronegativity
Semiempirical methods.	<ul style="list-style-type: none"> - Ab initio and semiempiric methods. - Hartree-Fock method. Base sets. Electronic correlation. Method of interaction of configurations. Methods of density functional. - Pi-electronic approach. - Free electron method (FEMO). - Theory of molecular orbitals applied to conjugated and aromatic molecules: Hückel approximation.
Fundamentals of Statistical Mechanics.	<ul style="list-style-type: none"> - Fundamentals of the mechano-statistical method. - Bases of statistical thermodynamics. - Statistical thermodynamic study of ideal gases. - Statistical interpretation of the thermodynamic properties of solids.

Planning				
Methodologies / tests	Competencies	Ordinary class hours	Student?s personal work hours	Total hours
Guest lecture / keynote speech	A1 A2 B1 B6 B9 C2 C3	32	50	82
Seminar	A1 A2 A3 A7 B1 B2 B3 B5 B7 B8 B9 C2 C3	16	36	52
Supervised projects	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
Mixed objective/subjective test	A1 A2 A3 A7 B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 C1 C2 C3	3	0	3
Personalized attention		1	0	1
(*)The information in the planning table is for guidance only and does not take into account the heterogeneity of the students.				

Methodologies	
Methodologies	Description
Guest lecture / keynote speech	<p>? Approximate duration of one hour and will be taught at the time approved by the board of the center.</p> <p>? The classes will be of master class type in which the teacher will expose the topics of the subject with the support of the necessary audiovisual means, indicating to the students the most important contents to take into account when studying and recommend chapters of books suitable for a greater understanding.</p> <p>? The teacher will facilitate the access of the students to all the audiovisual material used in the classes, as well as to other type of complementary material, in a way that helps them in their learning. Access to these materials will be through the Virtual Campus of the University.</p>



Seminar	<p>? Activity to be developed in small groups, where questions and problems related to the contents of the subject will be solved, with the support and direct supervision of the teacher.</p> <p>? Practical cases will be raised or doubts will be resolved.</p>
Supervised projects	<p>? Group activities that aim to promote autonomous learning of students, under the supervision of the teacher.</p> <p>? Activities related to content of interest of the subject will be proposed.</p> <p>Green Campus Program - Faculty of Science.</p> <p>To help achieve an immediate sustainable contour of the work carried out in this area:</p> <p>a. They will be requested mainly in virtual format and computer support.</p> <p>b. If done on paper:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Plastics will not be used. - Recycled paper will be used. - Drafts will be avoided.
Mixed objective/subjective test	<p>? Final exam of up to 3-4 hours that will consist of short questions, test questions and problems. The learning associated with all the contents developed in the subject will be evaluated.</p>

Personalized attention

Methodologies	Description
Supervised projects	<p>? The doubts that the student may have regarding the theory taught in the master classes, in problem solving, will be resolved.</p> <p>? The student will also be oriented, personally, in the study strategy of the subject.</p> <p>? The tutorials, in group or personal, will be carried out in the office of the teachers or through the TEAMS application. They can also be done using the virtual campus and / or email.</p> <p>? In the case of supervised works, each group of students must arrange a face-to-face tutoring with the teachers to discuss the proposed non-face-to-face activity.</p>

Assessment

Methodologies	Competencies	Description	Qualification
Supervised projects	A1 A2 A3 A7 B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B11 B12 C1 C2 C3 C4 C7 C8 C9	<p>? Group activities that aim to promote autonomous learning of students, under the supervision of the teacher.</p> <p>? Activities related to the contents of interest of the subject will be proposed.</p> <p>? Groups will have a maximum capacity of 4 people</p> <p>? The work involves:</p> <ul style="list-style-type: none"> o Oral presentation where it will be evaluated: <ol style="list-style-type: none"> 1.- Quality of the information contained in the presentation. 2.- Skills shown in the presentation, communication skills. 3.- Ability to defend the topic presented: objective, ideas, development and arguments. 4.- Presentation: clarity in the presentation, adequate vocabulary and care of spelling 5.- Answer/defense of the silver questions asked during the exhibition o Report of the work that includes the critical analysis of the results 	10



Mixed objective/subjective test	A1 A2 A3 A7 B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 C1 C2 C3	Final exam with two parts. One, the theoretical one (50%) which includes multiple choice questions, short answer and/or essay type, and, second, the numerical problems part (50%).	90
---------------------------------	---	---	----

Assessment comments

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

probos 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 avaliábeis 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 avaliados 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 comezar de cero co novo curso, é dicir ningunha das cualificacións obtidas durante un curso académico manteráse 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 primeira 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 dúas 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 estudos 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 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.Artigo 11, apartado 4 b), do Regulamento disciplinar do estudantado da UDC: Cualificación de

suspenso na convocatoria en que se cometa a falta e respecto da materia en que se cometese: o/a estudante será cualificado con ?suspenso? (nota numérica 0) na convocatoria correspondente do curso académico, tanto se a comisión da falta se produce 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.

Sources of information



Basic	<ul style="list-style-type: none">· 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
Complementary	<ul style="list-style-type: none">· 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 Mechanics with MatLab, Wiley-· Cruz, Chamizo, Garritz, (1987), Estructura atómica, Addison Wesley iberoamericana

Recommendations

Subjects that it is recommended to have taken before

Physics: Electricity and Magnetism/610G04007

Fundamentals of Mathematics/610G04001

Advanced Calculus /610G04009

Chemistry: Structure and Bonding/610G04005

Physics: Mechanics and Waves/610G04002

Subjects that are recommended to be taken simultaneously

Subjects that continue the syllabus

Computational Nanoscience and Nanotechnology/610G04034

Quantum Computing/610G04035

Solid State/610G04022

Spectroscopy/610G04017

Other comments

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. 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.

(*)The teaching guide is the document in which the URV publishes the information about all its courses. It is a public document and cannot be modified. Only in exceptional cases can it be revised by the competent agent or duly revised so that it is in line with current legislation.