



Guía Docente				
Datos Identificativos			2024/25	
Asignatura (*)	Fundamentos de Cuántica	Código	610G04015	
Titulación				
Descriptorios				
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	<a href="https://campusvirtual.udc.gal/course/view.php?id=15391">https://campusvirtual.udc.gal/course/view.php?id=15391</a>			
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) 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 estatística 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 / 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
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	B1	C2
	A2	B2	C3
	A3	B3	C7
	A7	B4	C9
		B5	
Adquirir habilidades no manexo e busca de bibliografía relacionada cos contidos da materia.	A1	B1	C1
	A2	B2	C2
	A3	B9	C4
	A7	B12	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: principio de correspondencia e de incerteza e superposición de estados.</li> <li>- Espazos de potencial. Confinamento e cuantización</li> </ul>
2. Estudo do movemento de traslación de partículas confinadas en pozos de potencial	<ul style="list-style-type: none"> <li>- A partícula libre</li> <li>- Pozo de potencial mono-dimensional: modelo da partícula nunha caixa. Funcións de onda e niveis de enerxía.</li> <li>- Pozos de potencial bi- e tri-dimensionais. Separación de variables e degeneración.</li> <li>- Estudo de outros pozos de potencial</li> <li>- Efecto Túnel</li> </ul>
3. Estudo do movemento de vibración	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Modelo do oscilador armónico para o estudo do movemento de vibración</li> <li>- Aplicación do modelo do oscilador para o estudo de vibración de moléculas: funcións de onda. Niveis de enerxía vibracionais. Anarmonicidade.</li> <li>- Aplicacións do modelo de oscilador armónico para o estudo da condutividade térmica de sólidos: fonóns</li> <li>- Movemento de partículas en pozos de potencial parabólicos de diferentes dimensións. Niveis electrónicos.</li> </ul>
4. Estudo do movemento de rotación	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Momento angular en mecánica clásica</li> <li>- Momento angular en mecánica cuántica</li> <li>- Estudo do movemento de rotación de partículas confinadas en espazos circulares, cilíndricos e esféricos: modelos de partícula nun anel, nun disco e nunha esfera. Niveis electrónicos</li> <li>- Estudo do movemento de rotación de moléculas: modelo do rotor ríxido. Enerxía de rotación: niveis rotacionais. Armónicos esféricos.</li> <li>- Cuantización do momento angular.</li> </ul>
5. Estudo dos átomos hidroxenóides	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Resolución da ecuación de Schrödinger para o átomo ou ión hidroxenóide.</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 da perturbación.</li><li>- Método de variacións: teorema variacional.</li><li>- Funcións variacionais lineais: ecuacións seculares.</li><li>- Aplicacións de métodos aproximados á química cuántica</li></ul>
7. Estudo dos átomos polieletrónicos	<ul style="list-style-type: none"><li>- Estudo do átomo de helio.</li><li>- Orbitais Slater</li><li>- Correlación electrónica: método de campo autoconsistente Hartree-Fock.</li><li>- Momento angular de xiro.</li><li>- Antisimetría: principio de exclusión de Pauli.</li><li>- Táboa periódica.</li><li>- Configuración electrónica, termos e niveis</li><li>- Momento angular orbital total: acoplamentos espín-órbita e jj</li><li>- As regras de Hund.</li><li>- Espectroscopia atómica. Termos atómicos. Normas de selección.</li></ul>
8. Estudo do enlace químico. Introducción ao estudo das moléculas	<ul style="list-style-type: none"><li>- O Hamiltoniano molecular</li><li>- Aproximación de Born-Oppenheimer.</li><li>- Teoría dos orbitais moleculares e teoría do enlace de valencia.</li><li>- Aplicación do método dos orbitais moleculares ao ión da molécula de hidróxeno.</li><li>- Orbitais moleculares: enlaces e antienlaces.</li><li>- Moléculas diatómicas homonucleares.</li><li>- Moléculas diatómicas heteronucleares.</li><li>- Enlace polar: electronegatividade</li><li>- Termos moleculares</li><li>- Superficies de enerxía potencial</li></ul>
9. Fundamentos de Mecánica Estatística	<ul style="list-style-type: none"><li>- Fundamentos do método mecano-estadístico.</li><li>- Bases da termodinámica estatística.</li><li>- Estudo termodinámico estatístico dos gases ideais.</li><li>- Interpretación estadística das propiedades termodinámicas dos sólidos.</li></ul>
10.- Efectos cuánticos en nanoestruturas	<ul style="list-style-type: none"><li>- Macroestruturas vs nanoestruturas metálicas</li><li>- Aplicación da mecánica cuántica ao estudo da condutividade de sólidos metálicos macroscópicos: modelo do electrón libre nun potencial periódico. Teoría de bandas: funcións de Bloch e teorema de Bloch.</li><li>- Aplicación da termodinámica estatística ao estudo da condutividade de sólidos metálicos macroscópicos: A función de Fermi. Densidade do estado e ocupación. Enerxía Fermi,</li><li>- Estudo da cuantización en sistemas nanoscópicos: pozos cuánticos, cables cuánticos, pozos cuánticos e outras nanoestruturas máis complexas. Aplicacións en dispositivos electrónicos.</li></ul>
11. Métodos semiempíricos	<ul style="list-style-type: none"><li>- Métodos ab initio e semiempíricos.</li><li>- Método OM para moléculas poliatómicas: aprox. valencia dirixida. -Orbitais híbridos</li><li>- Método Hartree-Fock para moléculas.</li><li>- Teoría OM aplicada a moléculas conxugadas e aromáticas: aproximación de Hückel.</li><li>- Teoría de bandas</li><li>- Máis aló da aproximación Hartree-Fock: métodos post-HF</li><li>- Introducción á química computacional: métodos de interacción de configuración e métodos funcionais de densidade</li></ul>



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 C3 C2	16	31	47
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 de resposta múltiple	A2 A7 B1 B2 B5 B7 B8 B9	0	5	5
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 interés da materia. 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"> <li>- Non se utilizarán plásticos.</li> <li>- Empregarase papel reciclado.</li> <li>- Evitarase a realización de borradores.</li> </ul>
Proba de resposta múltiple	<p>? Durante o curso realizaranse varias probas de resposta múltiple moi breves (máximo 10 preguntas), utilizando o campus virtual, cada vez que se remate un tema, co fin de estimular ao alumnado a realizar un estudo diario da materia e potenciar unha avaliación continua.</p>



Proba mixta	<p>?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.</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 persoalizado, na estratexia de estudo da asignatura.</p> <p>?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.</p> <p>?No caso dos traballos tutelados, cada grupo de estudantes deberá concertar unha titoría presencial coas profesoras para discutir a actividade non presencial proposta.</p>

### 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	<p>?Actividades en grupo que pretenden promover a aprendizaxe autónoma dos estudantes, baixo a tutela do profesor.</p> <p>?Propóñense actividades relacionadas con contidos de interese da materia.</p> <p>?Os grupos terán unha capacidade máxima de 4 persoas</p> <p>? O traballo implica:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>o Presentación oral onde se evaluará:           <ol style="list-style-type: none"> <li>1.- Calidade da información contida na presentación.</li> <li>2.- Habilidades amosadas na presentación, aptitudes de comunicación.</li> <li>3.- Capacidade para defende-lo traballo presentado: obxectivo, ideas, desenrolo e argumentos.               <ol style="list-style-type: none"> <li>4.- Presentación: claridade na exposición, vocabulario adecuado e coidado da ortografía</li> <li>5.- Resposta/defensa das preguntas plantexadas durante a exposición</li> </ol> </li> </ol> </li> <li>o Informe do traballo que inclúe a análise crítica dos resultados</li> </ul>	10
Proba mixta	A1 A2 A3 A7 B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 C1 C2 C3	<p>?Exame final de ata 3-4 horas de duración que constará de dúas 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.</p> <p>? Terá lugar nas datas aprobadas por la Junta de Profesorado del Centro.</p>	80
Proba de resposta múltiple	A2 A7 B1 B2 B5 B7 B8 B9	Realización de varias probas curtas dun máximo de 7 preguntas cada unha. As preguntas poden ser de varios tipos: resposta múltiple, verdadeiro/falso, completar frases, etc. Realizaranse durante as clases maxistrais, ao día seguinte de rematar un tema	10

### 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":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 e probas de resposta múltiple, mentres que a cualificación da proba mixta da segunda oportunidade substituirá a obtida na proba mixta da primeira oportunidade.

É dicir os traballos tutelados e probas de resposta múltiple 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 y terase en conta a

Normativa da universidade: <https://www.udc.es/es/normativa/academica/>? Plaxio e fraude na realización de tarefas e/ou probas. Será de aplicación o recollido na normativa da Universidade da Coruña ?Normas de avaliación, revisión e reclamación das cualificacións dos estudos de grao e máster

universitario [mixta, en calquera de ambas oportunidades, agás que se indique o contrario,](https://www.udc.es/es/normativa/academica/Durante a realización das proba obxectiva e</a></p></div><div data-bbox=)

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.

## 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



<b>Bibliografía complementaria</b>	<p>· 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 Mechanims with MatLab, Wiley· Cruz, Chamizo, Garritz, (1987), Estructura atómica, Addison Wesley iberoamericana</p>
------------------------------------	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

## 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. 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