



Teaching Guide

Identifying Data				
Subject (*)			Code	2021/22
Fundamentals of Quantum Theory			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		E-mail	isabel.fernandez.perez@udc.es
	Garcia Dopico, Maria Victoria			victoria.gdopico@udc.es
Web	https://campusvirtual.udc.gal/course/view.php?id=15391			
General description	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.			
Contingency plan	1. Modifications to the contents 2. Methodologies *Teaching methodologies that are maintained *Teaching methodologies that are modified 3. Mechanisms for personalized attention to students 4. Modifications in the evaluation *Evaluation observations: 5. Modifications to the bibliography or webgraphy			

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 interdisciplinarios o transdisciplinarios, 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		
Coñecer os principios da mecánica cuántica	A1	B2	C1
	A2	B6	C2
	A3	B8	C3
	A7	B9	
		B11	
Coñecer os principios da mecánica estatística	A1	B1	C2
	A2		
	A3		
	A7		



Aplicar os contidos teóricos adquiridos á explicación de fenómenos experimentais	A1	B1	C1
	A2	B2	C2
	A3	B3	C3
	A7	B4	C8
		B6	
		B7	
		B8	
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

Contents	
Topic	Sub-topic
1. Introducción á Mecánica Cuántica: Postulados	- 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	- 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 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	- 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	- 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. Introdución 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. - Curvas de enerxía potencial
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.

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 C3 C2	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	10	10
Objective test	A1 A2 A3 A7 B1 B2 B3 B4 B6 B7 B8 B9 B12 C2 C3 C9	2	0	2
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	? 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 comprensión. ? 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 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.
Seminar	?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.
Supervised projects	?Actividades en grupo que pretenden promover a aprendizaxe autónoma dos estudantes, baixo a tutela do profesor. ?Propóñense actividades relacionadas con contidos de interés da materia, que deben resolverse en grupo e explicarse posteriormente ao profesor nunha titoría presencial. 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.
Objective test	?Realizaráanse dúas probas curtas ao longo do cuadrimestre, - Na primeira proba avalíase a aprendizaxe asociada, aos fundamentos básicos de Mecánica Cuántica. - Na segunda proba avalíase a aprendizaxe asociada á aplicación da Mecánica Cuántica a sistemas sinxelos. ?As probas poderán combinar preguntas de resposta múltiple e/ou de resposta breve.
Mixed objective/subjective test	?Exame final de ata 3 horas de duración que terá preguntas curtas, de resposta múltiple e problemas. Avalíase a aprendizaxe asociada a todos os contidos desenvolvidos na materia. ?Realizarase nas datas aprobadas pola Xunta de Facultade do Centro.



Personalized attention

Methodologies	Description
Supervised projects	?Resolveranse as dúbidas que poida ter o/a estudante en canto á teoría impartida nas leccións maxistrais, en resolución de problemas. ?Igualmente orientarase o estudante, de xeito persoalizado, na estratexia de estudo da asignatura. ?As titorías, en grupo ou personais, realizaranse 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 co profesor correspondente para discutir a actividade non presencial proposta.

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	?Actividades en grupo que pretenden promover a aprendizaxe autónoma dos estudantes, baixo a tutela do profesor. ?Propóñense 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	15
Mixed objective/subjective test	A1 A2 A3 A7 B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 C1 C2 C3	?Exame final de ata 3 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.	60
Objective test	A1 A2 A3 A7 B1 B2 B3 B4 B6 B7 B8 B9 B12 C2 C3 C9	?Realizaráanse dúas probas curtas ao longo do cuadrimestre, - Na primeira proba avalíase a aprendizaxe asociada, aos fundamentos básicos de Mecánica Cuántica. - Na segunda proba avalíase a aprendizaxe asociada á aplicación da Mecánica Cuántica a sistemas sinxelos. ?As probas poderán combinar preguntas de resposta múltiple e/ou de resposta breve.	25

Assessment comments



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 no 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 estudiante que realice actividades avaliables 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, 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. 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 tutorías.

Sources of information

Basic	· 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
Complementary	· 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). FISICOQUÍMICA 5ª edición. McGraw-Hill· James R. Chelikowsky, (2019) Introductory Quantum Mechanims 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.