



Guía docente

Guía docente				
Datos Identificativos				2023/24
Asignatura (*)	Fundamentos de Cuántica		Código	610G04015
Titulación	Grao en Nanociencia e Nanotecnoloxía			
Descriptorios				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Grado	1º cuatrimestre	Segundo	Obligatoria	6
Idioma	CastellanoGallegoInglés			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinador/a	Garcia Dopico, Maria Victoria	Correo electrónico	victoria.gdopico@udc.es	
Profesorado	Fernandez Perez, Maria Isabel	Correo electrónico	isabel.fernandez.perez@udc.es	
	Garcia Dopico, Maria Victoria		victoria.gdopico@udc.es	
Web	https://campusvirtual.udc.gal/course/view.php?id=15391			
Descripción general	La química es una disciplina que se encarga de estudiar la materia, sus propiedades, transformaciones y su interacción con la radiación electromagnética y, ese estudio, conlleva poder describir el comportamiento de los elementos básicos que constituyen la materia (electrones y núcleos atómicos), es decir el conocimiento de la materia a nivel microscópico. Y es a lo que nos dedicaremos en esta asignatura, a descubrir las leyes de la mecánica que permiten explicar la conducta de las partículas microscópicas, ya que estas no obedecen a las leyes de la física clásica sino a la poco intuitiva mecánica cuántica. Es indispensable saber aplicar de forma rigurosa sus principios para derivar las leyes que gobiernan la materia, su estructura, los tipos de enlace y sus transformaciones, y ver cómo tienen importantes consecuencias a nivel macroscópico. Una vez que conozcamos las bases de la mecánica cuántica, introduciremos los fundamentos de la mecánica estadística que nos sirve de puente para calcular las propiedades macroscópicas de la materia utilizando la mecánica cuántica. Todos los conceptos de estas nuevas mecánicas se aplicarán para simular y analizar las propiedades de la materia a escala nanoscópica			

Competencias del título

Código	Competencias del 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 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

Resultados de aprendizaje			
Resultados de aprendizaje	Competencias del título		
Conocer los principios de la mecánica cuántica	A1	B2	C1
	A2	B6	C2
	A3	B8	C3
	A7	B9	
Conocer los principios de la mecánica estadística		B11	
	A1	B1	C2
	A2		
	A3		
Aplicar los contenidos teóricos adquiridos a la explicación de fenómenos experimentales	A7		
	A1	B1	C1
	A2	B2	C2
	A3	B3	C3
Saber aplicar los principios de la mecánica cuántica para descripción de la estructura y las propiedades de átomos y moléculas	A7	B4	C8
		B6	
		B7	
		B8	
Adquirir destreza en el manejo y la búsqueda de bibliografía relacionada con los contenidos de la asignatura.	A1	B1	C1
	A2	B2	C2
	A3	B9	C4
	A7	B12	C8

Contenidos	
Tema	Subtema



1. Introducción a la Mecánica Cuántica: Postulados	- Antecedentes históricos - Postulados de la Mecánica Cuántica - Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo - Importancia de los postulados: principios de correspondencia, de incertidumbre de Heisenberg y de superposición de estados
2. Movimiento de traslación: modelo de la partícula en una caja	- La partícula libre - La partícula en una caja monodimensional: Funciones de onda y niveles de energía. - La partícula en una caja bi y tridimensional: Separación de variables y degeneración. - Efecto Túnel - Aplicaciones de la partícula en una caja. Pozos cuánticos, hilos cuánticos y puntos cuánticos
3. Movimiento de vibración: modelo del oscilador armónico	- Tratamiento clásico del oscilador armónico - Tratamiento cuántico de oscilador: Funciones de onda: Polinomios de Hermite. - Energía de vibración: niveles energéticos. - El oscilador armónico como modelo de vibración de moléculas. - Anarmonicidad.
4. Movimiento de rotación: modelo del rotor rígido	- Momento angular en mecánica clásica. - Momento angular en mecánica cuántica: Funciones de onda: Polinomios de Legendre. Armónicos esféricos. - El rotor rígido de dos partículas: Energía de rotación: niveles energéticos. - Cuantización del momento angular.
5. Átomos hidrogenoides	- Resolución de la ecuación de Schrodinger para el átomo o ión hidrogenoide. - Funciones de onda radial y angular. - Niveles energéticos. - Orbital atómico. - Función de distribución radial. - Funciones de onda reales: representación radial y angular. - Efecto Zeeman.
6. Métodos aproximados	- Resolución de ecuación de Schrodinger en sistemas de interés químico - Método de perturbaciones. - Método de variaciones: teorema variacional. - Funciones variacionales lineales: ecuaciones seculares. - Aplicaciones de los métodos aproximados a la química cuántica
7. Átomos polielectrónicos	- Estudio del átomo de helio. - Orbitales de Slater - Método del campo autoconsistente de Hartree-Fock - Momento angular de spin. - Antisimetría: Principio de exclusión de Pauli. - Tabla Periódica. - Configuración electrónica. - Momento angular orbital total: acoplamientos spin-orbita y jj - Las reglas de Hund. - Espectroscopía atómica. Términos atómicos. Reglas de selección. - Paramagnetismo atómico



8. El enlace químico. Introducción al estudio de moléculas	- El hamiltoniano molecular - Aproximación de Born-Oppenheimer. - Teoría de orbitales moleculares y teoría de enlace de valencia. - Aplicación del método de orbitales moleculares al ion molécula de hidrógeno. - Orbitales moleculares: enlazante y antienlazante. - Moléculas diatómicas homonucleares. - Moléculas diatómicas heteronucleares. - Enlace polar: electronegatividad
9. Métodos semiempíricos	- Métodos ab initio y semiempíricos. Método de Hartree-Fock. Conjuntos de base. Correlación electrónica. Método de interacción de configuraciones. Métodos del funcional de la densidad. - Aproximación pi-electrónica. - Método del electrón libre (FEMO). - Teoría de orbitales moleculares aplicada a moléculas conjugadas y aromáticas: aproximación Hückel.
10. Fundamentos de Mecánica Estadística	- Fundamentos del método mecano-estadístico. - Bases de la termodinámica estadística. - Estudio termodinámico estadístico de gases ideales. - Interpretación estadística de las propiedades termodinámicas de los sólidos.

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competencias	Horas presenciales	Horas no presenciales / trabajo autónomo	Horas totales
Sesión magistral	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
Trabajos 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
Prueba 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
(*) Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos				

Metodologías	
Metodologías	Descripción



Sesión magistral	? Duración aproximada de una hora y se impartirá en el horario aprobado por la junta del centro. ? Las clases serán de tipo master class en las que el docente expondrá los temas de la asignatura con el apoyo de los medios audiovisuales necesarios, indicando a los alumnos lo más importante a tener en cuenta a la hora de estudiar y recomendar capítulos. libros adecuados para una mayor comprensión. ? Se fomentará la participación del alumno en las clases, sin embargo, en las clases de seminario y tutoría, el alumno tiene más oportunidades de resolver todas aquellas dudas que le hayan podido surgir durante su estudio. ? El profesor facilitará el acceso de los alumnos a todo el material audiovisual utilizado en las clases, así como a otro tipo de material complementario, de forma que les ayude en su aprendizaje. El acceso a estos materiales será a través del Campus virtual de la Universidad o a través del servicio de reprografía del centro.
Seminario	? Actividad a desarrollar en pequeños grupos, donde se resolverán cuestiones y problemas relacionados con los contenidos de la asignatura, con el apoyo y supervisión directa del profesor. ? Se plantearán casos prácticos o se resolverán dudas.
Trabajos tutelados	? Actividades grupales que tienen como objetivo promover el aprendizaje autónomo de los estudiantes, bajo la tutela del docente. ? Se propondrán actividades relacionadas con contenidos de interés de la asignatura. Programa Green Campus - Facultad de ciencias Para ayudar a conseguir un contorno inmediato sustentable los trabajos que se realicen en esta materia: a. Se solicitarán principalmente en formato virtual y soporte informático. b. De realizarse en papel: - No se emplearán plásticos. - Se empleará papel reciclado. - Se evitará la realización de borradores.
Prueba mixta	? Examen final de hasta 3-4 horas que constará de preguntas breves, preguntas tipo test y problemas. Se evaluarán los aprendizajes asociados a todos los contenidos desarrollados en la asignatura. ? Tendrá lugar en las fechas aprobadas por la Junta de Facultad del Centro.

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Trabajos tutelados	?Se resolverán las dudas que pueda tener el/la estudiante en cuanto a la teoría impartida en las lecciones magistrales, en resolución de problemas. ?Igualmente se orientará al estudiante, personalmente, en la estrategia de estudio de la asignatura. ?Las tutorías, en grupo o personales, se realizarán en el despacho de las profesoras o a través de la aplicación TEAMS. Igualmente podrán realizarse empleando el campus virtual y/o correo electrónico. ?En el caso de los trabajos tutelados, cada grupo de estudiantes deberá concertar una tutoría presencial con las profesoras para discutir la actividad no presencial propuesta.

Evaluación

Metodologías	Competencias	Descripción	Calificación
--------------	--------------	-------------	--------------



Trabajos 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 el aprendizaje autónomo de los estudiantes, bajo a tutela del profesor. ?Se propondrán actividades relacionadas con los contenidos de interés de la materia. ?Los grupos tendrán una capacidad máxima de 4 personas ? El trabajo implica: - o Presentación oral donde se evaluará: 1.- Calidad de la información contenida en la presentación. 2.- Habilidades mostradas en la presentación, aptitudes de comunicación. 3.- Capacidad para defender el tema presentado: objetivo, ideas, desarrollo y argumentos. 4.- Presentación: claridad en la exposición, vocabulario adecuado y cuidado de la ortografía 5.- Respuesta/defensa de la preguntas planteadas durante a exposición - o Informe del trabajo que incluye el análisis crítico de los resultados	10
Prueba mixta	A1 A2 A3 A7 B1 B2 B3 B4 B5 B6 B7 B8 B9 B12 C1 C2 C3	? Examen final de hasta 3-4 horas que constará de dos partes: una de corte teórico (50%) que incluye preguntas de respuesta breve, tipo test y/o de ensayo; y otra de solución de problemas (50%) en la que se evaluará la habilidad en la aplicación de los contenidos teóricos para la resolución de problemas numéricos. ? Tendrá lugar en las fechas aprobadas por la Junta de Profesorado del Centro.	90

Observaciones evaluación



· Requisitos para aprobar la asignatura:- Para aprobar la asignatura es necesario obtener una nota mínima de 4 (sobre un máximo de 10) en cada una de la partes de la prueba mixta. - Si no se alcanza la nota mínima de 4 en las pruebas anteriores, se suspenderá la asignatura, aunque la media de las notas obtenidas con las diferentes metodologías sea superior a 5 (sobre un máximo de 10). En este caso la nota final otorgada será de 4 (sobre 10).· Calificación "No presentado":- Se considerará presentado todo alumno que realice actividades evaluables siempre que represente más del cuarenta por ciento de la nota global.· Segunda oportunidad:- La segunda oportunidad en julio se entiende como una segunda oportunidad para realizar la prueba mixta final. En consecuencia, se mantienen las calificaciones obtenidas del trabajo tutelado, mientras que la calificación de la prueba mixta de la segunda oportunidad sustituirá a la obtenida en la prueba mixta de la primera oportunidad. Es decir, en la segunda oportunidad no cabe evaluar de nuevo los trabajos tutelados. Sucesivos cursos académicos: El proceso de enseñanza-aprendizaje, incluida la evaluación, se refiere a un curso académico, y por tanto vuelta a comenzar de cero con el nuevo curso, es decir ninguna de las calificaciones obtenidas durante un curso académico se mantiene para el siguiente. Matrícula de honor: En el caso de que haya varios estudiantes, con idéntica calificación numérica, que puedan optar a la matrícula de honor, se les convocará a una prueba escrita siempre y cuando el número de matrículas a las que se pueda optar sea inferior al de estudiantes en dicha situación. Cabe señalar que en la segunda oportunidad se podrá optar a la matrícula de honor si el número máximo de éstas no se tiene cubierto en su totalidad en la primera oportunidad. Estudiantes con reconocimiento a la dedicación a tiempo parcial y dispensa académica de la exención de asistencia: Es necesario que el alumnado informe al profesor al principio del curso de esta situación. Son de aplicación, para ambas oportunidades los anteriores criterios de evaluación ? Plagio y fraude en la realización de tareas y/o pruebas. Será de aplicación lo establecido en la normativa de la Universidade da Coruña no Artigo 14 das ?Normas de evaluación, revisión y reclamación de las calificaciones de los estudios de grado y máster universitario (CG 19/12/2013, modificado por el CG 30/04/2014, por el CG 24/07/2014, por el CG 29/01/2015, CG 28/09/2016 y CG 29/06/2017). Durante la realización de pruebas objetivas y mixtas, en cualquiera de las dos oportunidades, salvo que se indique lo contrario, queda prohibido el uso de cualquier dispositivo con acceso a Internet. Aunque no es recomendable traer estos dispositivos a esta actividad, se podrá habilitar un espacio para su almacenamiento, sin que ello implique ningún tipo de responsabilidad por parte de la UDC, la Facultad o los profesores presentes durante la prueba objetiva. Si durante la prueba objetiva, existen indicios del uso de estos dispositivos, el alumno será automáticamente expulsado del aula, se calificará la prueba objetiva como suspensa y se informará por escrito a la dirección del centro según establece la normativa correspondiente. Artículo 11, apartado 4 b), del Reglamento disciplinar del estudiante de la UDC; Calificación de suspenso en la convocatoria en que se cometa la falta y respeto de la materia en que se cometiera: el/la estudiante será calificado con ?suspenso? (nota numérica 0) en la convocatoria correspondiente del curso académico, tanto se la comisión de la falta se produce en la primera oportunidad como en la segunda. Para esto, se procederá a modificar su cualificación en el acta de primera oportunidad, si fuera necesario. Según se recoge en las distintas normativas de aplicación para la docencia universitaria se incorpora la perspectiva de género en esta materia.

Fuentes de información

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
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). FISICOQUÍMICA 5ª edición. McGraw-Hill· James R. Chelikowsky, (2019) Introductory Quantum Mechanims with MatLab, Wiley· Cruz, Chamizo, Garritz, (1987), Estructura atómica, Addison Wesley iberoamericana

Recomendaciones

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente



Electricidad y Magnetismo/610G04007

Fundamentos de Matemáticas/610G04001

Ampliación de Cálculo/610G04009

Química: Enlace y Estructura/610G04005

Mecánica y Ondas/610G04002

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Asignaturas que continúan el temario

Nanociencia y Nanotecnología Computacional/610G04034

Computación Cuántica/610G04035

Estado Sólido/610G04022

Espectroscopía/610G04017

Otros comentarios

Se recomienda que el alumno revise los conceptos teóricos introducidos en las clases de teoría resolviendo las preguntas y ejercicios propuestos que aparecen al final de cada tema en los libros recomendados. No se recomienda estudiar SOLO para apuntes de clase que NUNCA deben reemplazar la consulta de ninguno de los libros recomendados. Puede resultar muy ÚTIL utilizar las horas de tutoría para aclarar dudas y profundizar en los conocimientos asociados a la asignatura. Programa Green Campus - Facultade de ciencias Para ayudar a conseguir un contorno inmediato sustentable los trabajos/documentos /exámenes que se realicen en esta materia: a. Se solicitarán principalmente en formato virtual y soporte informático. b. De realizarse en papel: - No se emplearán plásticos. - Se empleará papel reciclado. - Se evitará la realización de borradores.

(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías