

60118 - Teoría cuántica de la materia

Guía docente para el curso 2012 - 2013

Curso: 1, Semestre: 0, Créditos: 8.0

Información básica

Profesores

- **José Luis Alonso Buj** buj@unizar.es
- **Alberto Castro Barrigón** acastro@unizar.es
- **Luis Martín Moreno** lmm@unizar.es
- **Pablo Echenique Robba** pnique@unizar.es

Recomendaciones para cursar esta asignatura

Se recomienda una formación básica Materia Condensada, Mecánica Cuántica y en Técnicas computacionales.

Actividades y fechas clave de la asignatura

- Fecha de inicio de la asignatura: La asignatura se iniciará en la fecha decidida por la Facultad de Ciencias para el inicio del curso: 19/09/2011.
- Fecha de finalización de la asignatura: La asignatura finalizará en la fecha decidida por la Facultad de Ciencias para la finalización del curso: 27/1/2012.

Inicio

Resultados de aprendizaje que definen la asignatura

El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados...

1:

Dispone de las herramientas teóricas y computacionales adecuadas para estudiar los sistemas físicos hamiltonianos, así como aquellos sistemas que sólo son abordables o bien resolviendo la ecuación de Schrödinger para un sistema de muchos cuerpos o usando la teoría del Funcional de Densidad (DFT).

2:

Habrá aprendido como realizar cálculos numéricos en Química Cuántica Computacional.

Introducción

Breve presentación de la asignatura

Después de una perspectiva de evolución histórica y de relación con otras materias del Master en Física y Tecnologías Físicas, se describe como la Mecánica Cuántica explica la física y la química de la Materia Condensada Inorgánica y Orgánica. Se recomienda una formación básica Materia Condensada, Mecánica Cuántica y en Técnicas computacionales.

Contexto y competencias

Sentido, contexto, relevancia y objetivos generales de la asignatura

La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:

Esta asignatura es recomendable para cualquier alumno que sienta interés en conocer el origen microscópico de:

El transporte electrónico, la superconductividad, la superfluidez, los enlaces químicos y las reacciones químicas.

Para ello se definirán las cuasipartículas y se usará la técnica de la segunda cuantización y la Teoría del Funcional Densidad (DFT).

Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

Después de una perspectiva de evolución histórica y de relación con otras materias del Master en Física y Tecnologías Físicas, se describe como la Mecánica Cuántica explica la física y la química de la Materia Condensada Inorgánica y Orgánica.

Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para...

1:

Decidir que sistemas nanométricos pueden abordarse usando modelos hamiltonianos.

2:

Decidir cuales de estos sistemas se necesitan para su comprensión y para predecir el resultado de los experimentos la resolución de la ecuación de Schrödinger de muchos cuerpos o el uso de la DFT.

Importancia de los resultados de aprendizaje que se obtienen en la asignatura:

Hoy día la Nanociencia requiere saber, en la medida de lo posible, en que casos uno puede usar modelos hamiltonianos para predecir resultados experimentales y diseñar nuevos experimentos y cuando hay que recurrir al estudio de la correspondiente ecuación de Schrödinger o de las ecuaciones de Kohn-Sham (en DFT). También desde hace una decena de años muchos procesos químicos son abordables computacionalmente, lo que es de sumo interés como complemento e inspiración de los experimentos.

Evaluación

Actividades de evaluación

El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos

mediante las siguientes actividades de evaluación

1:

Se llevará a cabo una evaluación continuada, proceso que se realizará por medio de preguntas en clase sobre los temas explicados y la resolución de ejercicios o casos prácticos simples por parte de los estudiantes. Esta evaluación continuada supondrá aproximadamente el 60% de la calificación final del estudiante en la asignatura.

2:

Se evaluará también la capacidad del alumno para realizar cálculos numéricos en Química Cuántica y/o en Materia Condensada. Esta actividad computará aproximadamente un 40%.

3:

Prueba de evaluación global

En principio esta asignatura está diseñada para estudiantes presenciales. No obstante en el caso de que hubiera estudiantes no presenciales o estudiantes que tuvieran que presentarse en sucesivas convocatorias por no haber superado la asignatura en primera convocatoria, estos realizarían una serie de pruebas. Dichas pruebas consistirán básicamente en el mismo tipo de ejercicios que los estudiantes habrán ido realizando a lo largo de la asignatura, ya que se trata de pruebas directamente relacionadas con los resultados de aprendizaje previstos para la asignatura. Los ejercicios se realizarán en un solo día y serán los siguientes.

Prueba 1. Examen teórico-práctico sobre los temas desarrollados en durante el curso (ver contenidos en la sección "Actividades de aprendizaje programadas"). Día del examen: en el periodo designado para exámenes por la Facultad de Ciencias. Tiempo disponible: 3 horas. Valoración de uno a diez. La calificación de esta prueba representará el 60% de la calificación final.

Prueba 2. Preparación de un cálculo numérico de materia condensada o química cuántica. La calificación de esta prueba supondrá, aproximadamente, un 40%.

Actividades y recursos

Presentación metodológica general

El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en lo siguiente:

Esta asignatura consta de dos partes o acciones formativas diferenciadas. La primera acción formativa es la adquisición de conocimientos básicos de la Mecánica Cuántica de Muchos Cuerpos. Dicha acción se llevará a cabo por medio de 40 h de clases teóricas (presenciales).

La segunda actividad formativa se centrará en la implementación computacional de las ecuaciones de Kohn-Sham.

Actividades de aprendizaje programadas (Se incluye programa)

El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades...

1:

Temas que se desarrollarán en las clases de teoría:

Definición de cuasipartícula.

Segunda cuantización.

Teoría de Perturbaciones (el líquido de Fermi, interacción electrónica mediada por fonones).
Funciones de Green.

Superconductividad.

Efecto Kondo.

Teoremas de Hohenberg-Kohm.

El punto de vista de Levy.

Las ecuaciones de Kohn-Sham.

La conexión adiabática, la Aproximación de la Densidad Local (LDA) la Aproximación del Gradiente Generalizado.

2:

Temas de las clases prácticas:

Uso de potentes paquetes de cálculo con un gran número de funciones: OCTOPUS, GAMES GAUSSIAN, etc.

Planificación y calendario

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

Referencias bibliográficas de la bibliografía recomendada

- Auerbach, Assa. *Interacting electrons and quantum magnetism* / Assa Auerbach . - [1st ed.] New York [etc] : Springer, cop.1994
- Gross, E.. *Many particle theory*. Adam Hilger. 1991
- Jensen, Frank. *Introduction to computational chemistry* / Frank Jensen . - 2nd ed. Chichester [etc.] : John Wiley & Sons, cop. 2007
- Koch, Wolfram. *A chemist's guide to density functional theory*/ Wolfran Koch, Max C. Holthausen . - 2nd ed., 1st repr. Weinheim [etc.]: Wiley-VCH, cop. 2002
- Mattuck, R.D.. *A guide to Feynman diagrams in the Many-body*. Dover. 1976
- Parr, Robert G.. *Density-functional theory of atoms and molecules* / Robert G. Parr and Weitao Yang New York : Oxford University Press, 1994
- Shida, Tadamasa. *The chemical bond : a fundamental quantum-mechanical picture* / Tadamasa Shida Berlin [etc.] : Springer, cop. 2004