

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	43988
Nom	Fonaments matemàtics de la mecànica quàntica
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	5.0
Curs acadèmic	2021 - 2022

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2184 - M.U. en Química Teòrica i Modelització Computacional 13-V.1	Facultat de Química	1	Anual
3156 - Química Teòrica i Modelització Computacional	Escola de Doctorat	0	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2184 - M.U. en Química Teòrica i Modelització Computacional 13-V.1	1 - Fonaments	Obligatòria
3156 - Química Teòrica i Modelització Computacional	1 - Complementes de Formació	Optativa

Coordinació

Nom	Departament
SANCHEZ MARIN, JOSE	315 - Química Física
TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

RESUM**CONEIXEMENTS PREVIS**



Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

COMPETÈNCIES

2184 - M.U. en Química Teòrica i Modelització Computacional 13-V.1

- Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seua capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants siguen capaços d'integrar coneixements i afrontar la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, incloga reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.
- Que els estudiants sàpiguen comunicar les conclusions (i els coneixements i les raons últimes que les sustenten) a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats.
- Que els estudiants posseïsquen les habilitats d'aprenentatge que els permeten continuar estudiant d'una forma que haurà de ser en gran manera autodirigida o autònoma.
- Posseir i comprendre coneixements que aportin una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i / o aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.
- Els estudiants han de ser capaços de fomentar, en contextos acadèmics i professionals, l'avanç tecnològic i científic dins d'una societat basada en el coneixement i en el respecte a: a) els drets fonamentals i d'igualtat d'oportunitats entre hòmens i dones, b) els principis d'igualtat d'oportunitats i accessibilitat universal de les persones amb discapacitat i c) els valors propis d'una cultura de pau i de valors democràtics.
- L'estudiant és capaç d'adaptar-se a diferents entorns culturals.
- L'estudiant és capaç de resoldre problemes i prendre decisions.
- L'estudiant demostra el seu coneixement i comprensió dels fets aplicant conceptes, principis i teories relacionades amb la Química Teòrica i Modelització Computacional.
- Comprendre els fonaments teòrics i pràctics de tècniques amb les que pot analitzar l'estructura electrònica, morfològica i estructural d'un compost.

RESULTATS DE L'APRENENTATGE

**DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS**

1.

2.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	30,00	100
Seminaris	12,00	100
Elaboració de treballs individuals	30,00	0
Estudi i treball autònom	33,00	0
Preparació de classes pràctiques i de problemes	20,00	0
TOTAL	125,00	

METODOLOGIA DOCENT**AVALUACIÓ****REFERÈNCIES****Bàsiques**

- a) Nivel básico / Very basic level

Quantum Chemistry (6th edition 2008)

Ira N Levine

Prentice Hall

Student Solutions Manual for Quantum Chemistry

Ira N Levine

Molecular Quantum Mechanics (5th Edition 2010)

Peter W. Atkins , Ronald S. Friedman

Oxford University Press

Quantum Chemistry (2nd edition 2008)



Donald A. McQuarrie
University Science Books

Problems and Solutions for McQuarrie's Quantum Chemistry
Helen O. Leung , Mark Marshall

b) Nivel Recomendado / Recommended level

Quantum Mechanics, Volume 1 and 2
Claude Cohen-Tannoudji , Bernard Diu , Frank Laloe
Wiley-Interscience (2005)

Quantum Mechanics (2nd Edition, 2000)
B.H. Bransden, C.J. Joachain
Benjamin Cummings

Problems and Solutions in Quantum Chemistry and Physics
Charles S. Johnson Jr. , Lee G. Pedersen
Dover Publications (1987)

Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory
Attila Szabo , Neil S. Ostlund
Dover Publications (1996)

c) Nivel avanzado / Advanced level

Quantum Mechanics Non-Relativistic Theory, Third Edition: Volume 3
L. D. Landau , L. M. Lifshitz

Quantum Mechanics (2 Volumes in 1)
Albert Messiah

Quantum Mechanics (2 volumes)
Alberto Galindo, Pedro Pascual
Springer (1991)

ADDENDA COVID-19

Aquesta addenda només s'activarà si la situació sanitària ho requereix i previ acord del Consell de Govern