

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

Codi	44970
Nom	Fonaments matemàtics de la mecànica quàntica
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	5.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2245 - M.U. EM Química Teòrica i Modelització Computacional	Facultat de Química	1	Anual

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2245 - M.U. EM Química Teòrica i Modelització Computacional	1 - Fonaments	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
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 (RD 1393/2007) // RESULTATS DE L'APRENTATGE (RD 822/2021)****2245 - M.U. EM Química Teòrica i Modelització Computacional**

- 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 demostra el seu coneixement i comprensió dels fets aplicant conceptes, principis i teories relacionades amb la Química Teòrica i Modelització Computacional.
- L'estudiant està familiaritzat amb els postulats fonamentals de la Mecànica Quàntica necessaris per a un bon enteniment dels mètodes més comuns utilitzats en química quàntica.
- Els estudiants són capaços de resoldre problemes i prendre decisions de qualsevol índole davall el compromís amb la defensa i pràctica de les polítiques d'igualtat.
- Els estudiants són capaços de treballar en equip tant a nivell multidisciplinari com amb els seus propis parixes respectant el principi d'igualtat d'home i dones.
- El/la estudiant és capaç d'adaptar-se a diferents entorns culturals demostrant que respon al canvi amb flexibilitat.
- El/la estudiant és organitzat en el treball demostrant que sap gestionar el temps i els recursos de què disposa.
- Comprén els fonaments teòrics i pràctics de tècniques computacionals amb què pot analitzar l'estructura electrònica, morfològica i estructural d'un compost i interpreta adequadament els resultats.
- Els estudiants comprenen i manegen les ferramentes matemàtiques requerides per al desenvolupament de la Química Teòrica en els seus aspectes fonamentals i les seues aplicacions.

**RESULTATS D'APRENTATGE (RD 1393/2007) // SENSE CONTINGUT (RD 822/2021)****DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS**

1.

2.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	31,00	100
Seminaris	12,00	100
TOTAL	43,00	

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

- 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.



Complementàries

- 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).

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).