



Grado en Ingeniería de Materiales

Departamento (Escuela)

CIENCIA DE MATERIALES (ETSI Caminos Canales y Puertos)

Asignatura

Física Cuántica

ECTS	Tipo	Curso / Semestre	Idioma	Syllabus code	Subject Code
6	Obligatoria	2 / 3	ES	04MI	45000110

Profesorado	email	Tutorías
Juan Carlos Suarez Bermejo	juancarlos.suarez@upm.es	L (12:30-14:30) M (10:30-12:30) J (10:30-12:30)
Gonzalo Fuentes Iriarte	gonzalo.fuentes@upm.es	Jueves 14:00 – 16:00

El profesor que aparece en primer lugar es el coordinador de la asignatura

Criterio de evaluación**1. Opción Examen Final**

No hay que comunicar al Profesor que se elige esta opción. Basta con presentarse al Examen Final sin haberse presentado al Primer Parcial. Examen Final: 10 puntos

2. Opción Evaluación Continua.

No hay que comunicar al Profesor que se elige esta opción. Basta con presentarse al Primer Parcial para que se entienda que se sigue la opción de Evaluación Continua. Si un alumno se presenta al Primer parcial y lo suspende no podrá optar al trabajo de Seminario, pero puede continuar en Evaluación Continua y presentarse al Segundo Parcial. En cualquier momento el alumno puede decidir abandonar la Evaluación Continua y acudir a la opción de Examen Final, donde se obtendría el 100% de la nota final.

Primer Parcial: 3 puntos

Trabajo Seminario: 3 puntos

Segundo Parcial: 4 puntos

ESTRUCTURA DE LOS EXÁMENES

Todos los exámenes (Parciales y Finales) tienen la misma estructura:

Parte teórica (2 puntos sobre 10). Preguntas cortas (media hoja máximo) sobre conceptos básicos de la FC. Se suministra lista de conceptos básicos que se han de conocer. Se proponen 4 preguntas, de las cuales el alumno elige 3 y descarta 1. Esta parte es eliminatoria. No se puede fallar en ninguna de las tres preguntas elegidas. La nota es bien un 1 (no se continúa corrigiendo el resto del ejercicio) o bien un 2 (se continúa con la corrección de los problemas).

Problema 1 (3 puntos sobre 10). Problema similar a los realizados o propuestos en clase.

Problema 2 (5 puntos sobre 10). Problema similar a los realizados o propuestos en clase.

Se requiere obtener al menos 5 puntos para aprobar el examen.

Justificación y Objetivos

El objetivo de la asignatura es introducir los fundamentos de la Física Cuántica de forma que resulte aplicable a la comprensión de las propiedades de los materiales. Se enfatizarán las conclusiones de mayor interés práctico deducidas de la ecuación de Schrödinger, y la forma de reducir problemas complejos a modelos simples. Se considerarán nociones de física atómica y molecular útiles para entender el comportamiento de los materiales cristalinos y no-cristalinos. Finalmente se mencionan, a un nivel elemental, algunos ejemplos de interés práctico en la ingeniería cuántica de los materiales, que permitan apreciar la potencialidad de lo aprendido en el Curso. Se pretende que esta asignatura resulte instrumental para abordar otras materias relacionadas con las propiedades de materiales estructurales y funcionales

**Grado en Ingeniería de Materiales****Prerrequisitos**

Sin prerrequisitos

Conocimientos previos

Física y Matemáticas de Bachillerato, Mecánica (1er curso 1er semestre), Matemáticas I (1er curso 1er semestre), Electricidad y Magnetismo (1er curso 1er semestre), Termodinámica (1er curso 2º semestre), Matemáticas II (1er curso 2º semestre)

Contenidos en coordinación con otras asignaturas

Las indicadas en conocimientos previos

Competencias genéricas

CG2, CG3, CG11

Competencias Específicas

CE2, CE5

Bibliografía

- Quantum Mechanics for Scientists and Engineers, David A.B. Miller, Cambridge University Press, 2008 (3ª reimpresión 2010)
- Introducción a la Mecánica Cuántica, Luis de la Peña, Fondo de Cultura Económica, 2006 (3ª Ed.)
- Problemas y Ejercicios de Mecánica Cuántica, Luis de la Peña y Mirna Villavicencio, Fondo de Cultura Económica, 2003
- Introduction to Quantum Mechanics in Chemistry, Materials Science, and Biology, S.M. Blinder, Elsevier, 2004
- Introduction to Quantum mechanics, A.C. Phillips, Wiley, 2003 (8ª reimpresión 2009)
- Electronic Basis of the Strength of Materials, John Gilman, Cambridge University Press, 2003 (1ª reimpresión 2008)
- Crystals, Defects and Microstructures: Modeling Across Scales, Rob Phillips, Cambridge University Press, 2001

Contenidos y distribución

LM: Lección magistral, RP: Resolución de problemas, LB: Laboratorio,, TI: Trabajo Individual, TG: Trabajo en Grupo, DB: Debate en Aula, VI: Visitas, EV: Evaluaciones, OT: Otro procedimiento

Ítem	Contenidos	Código
1	Fundamentos físico-matemáticos de la mecánica cuántica. Cálculo vectorial. Números complejos. Funciones especiales (funciones de Bessel, funciones asociadas de Legendre, armónicos esféricos, etc). Algebra de matrices. Eigenvectores y eigenvalores. Distribuciones (función delta de Dirac y función escalón de Heaviside). Mecánica clásica. Electrostática. Ondas y difracción. Ecuaciones de Maxwell y electromagnetismo.	LM
2	Introducción histórica. Radiación del cuerpo negro. Movimiento browniano. Efecto fotoeléctrico. Efecto Compton. Calor específico de los sólidos. La MC primitiva. La MC matricial. Dualidad onda-corpúsculo. La ecuación de onda de Schrödinger.	LM
3	Ondas y mecánica cuántica – Ecuación de Schrödinger estacionaria. Densidades de probabilidad. Experimento de la doble rendija. Partícula en una caja. Partículas y barreras de altura finita. Partículas en un pozo de potencial finito. Oscilador armónico. Problemas.	LM, RP
4	Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Relación con la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Superposición lineal en MC. Evolución temporal de paquetes de ondas. Medidas y valores esperados en MC. Halmiltoniano. Operadores y valores esperados. Operadores posición y momento. Principio de incertidumbre. Problemas.	LM, RP
5	Funciones y operadores en MC. Operadores lineales. Elementos de la matriz asociada a un operador. Operador identidad. Operadores unitarios. Operadores hermíticos. Conmutación de operadores. Forma general del principio de incertidumbre. Eigenvalores continuos y funciones delta. Problemas	LM,RP
	PRIMERA PRUEBA PARCIAL	EV



Grado en Ingeniería de Materiales

6	Métodos aproximados en MC. Aproximación semiclásica (método WKB). Teoría de perturbaciones no degeneradas independientes del tiempo. Efecto Stark. Perturbaciones degeneradas. Método variacional. Perturbaciones dependientes del tiempo. Efecto tunel. Matriz de transferencia. Factor de penetración para barreras que varían lentamente. Emisión de electrones através de una barrera de potencial. Problemas	LM, RP
7	Momentos angular y de spin. Operadores de momento angular. Vectores de estado para el momento angular de spin. Operadores para el momento angular de spin. Esfera de Bloch. Ecuación de Pauli. Efecto Zeeman anómalo. Adición de momentos angulares. Problemas.	LM, RP
8	El átomo de hidrógeno y orbitales atómicos. Hamiltoniano para el problema del átomo de hidrógeno. Soluciones del problema del átomo de hidrógeno. Átomos hidrogenoides. Orbitales atómicos. Problemas.	LM
9	Estructura atómica y sistema periódico. Principio de exclusión de Pauli. Configuración atómica. Periodicidad de las propiedades atómicas. Forma espiral del sistema periódico. Teoría del campo autoconsistente de Hartree (SCF). Problemas.	LM
10	Enlace químico. La molécula de hidrógeno. Teoría del enlace de valencia. Orbitales híbridos y geometría molecular. Valencia. Problemas.	LM
11	Teoría de orbitales moleculares I. Moléculas diatómicas. La molécula de hidrógeno ionizada. La aproximación LCAO. Moléculas diatómicas homonucleares. Computación variacional de orbitales moleculares. Moléculas heteronucleares. Electronegatividad. Problemas.	LM
12	Teoría de orbitales moleculares II. Moléculas poliatómicas y sólidos. Teoría del orbital molecular de Hückel. Conservación de la simetría orbital; reglas de Woodward-Hoffmann. Aproximación del electrón único en sólidos. Teoría de bandas en metales y semiconductores. Problemas.	LM
13	Partículas idénticas. Estadísticas cuánticas. Dispersión de partículas idénticas. Bosones y fermiones. Principio de exclusión de Pauli. Energía de intercambio. Extensión a más de dos partículas idénticas. Funciones de distribución térmica. Partículas distinguibles e indistinguibles. Problemas.	LM, RP
	SEGUNDA PRUEBA PARCIAL	EV
14	Descripción cuántica de materiales. Aproximación de Born-Oppenheimer. Método de Hartree-Fock. Teoría del Funcional Densidad. Estados puros y mezcla. Operador densidad. Evolución temporal de la matriz densidad. Interacción de la luz con un sistema atómico de dos niveles. Dinámica molecular a partir de primeros principios. Diseño de materiales utilizando herramientas informáticas para la determinación de la estructura electrónica. Ejemplos.	LM, TG
15	Información cuántica. Medidas mecano cuánticas y colapso de la función de onda. Criptografía cuántica. Entrelazamiento cuántico. Computación cuántica. Teleportación cuántica.	LM, TG
16	Interpretación de la mecánica cuántica. Variables ocultas y desigualdades de Bell. El problema de la medida. Soluciones al problema de la medida.	LM, TG
	PRUEBA DE EVALUACIÓN FINAL	EV