



**INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL**  
**SECRETARIA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO**  
**DIRECCIÓN DE POSGRADO**

*FORMATO GUÍA PARA REGISTRO DE ASIGNATURAS*

Hoja 1 de 3

**I. DATOS DEL PROGRAMA Y LA ASIGNATURA**

- 1.1 NOMBRE DEL PROGRAMA: Programa en Red de Doctorado en Nanociencias y Micro-Nanotecnología
- 1.2 COORDINADOR DEL PROGRAMA: \_\_\_\_\_
- 1.3 NOMBRE DE LA ASIGNATURA: Mecánica Cuántica
- 1.4 CLAVE: \_\_\_\_\_ (Para ser llenado por la SIP)
- 1.5 TIPO DE ASIGNATURA: OBLIGATORIA  OPTATIVA   
 SEMINARIO  ESTANCIA
- 1.6 NÚMERO DE HORAS: TEORÍA  6  PRACTICA  T-P
- 1.7 UNIDADES DE CRÉDITO:  12
- 1.8 FECHA DE LA ELABORACIÓN DEL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA: 

12	03	2012
d	m	a
- 1.9 SESIÓN DEL COLEGIO DE PROFESORES EN QUE SE ACORDÓ LA IMPLANTACIÓN DE LA ASIGNATURA: 

SESIÓN No.	<input type="checkbox"/>
------------	--------------------------

FECHA:	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
	d	m	a
- 1.10 FECHA DE REGISTRO EN SIP: 

<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
d	M	a

 (Para ser llenado por la SIP)

**II. DATOS DEL PERSONAL ACADÉMICO**

- 2.1 COORD. ASIGNATURA: ALEJANDRO MUÑOZ DIOSDADO CLAVE: \_\_\_\_\_
- 2.2 PROFR. PARTICIPANTE: JAIME ORTIZ LOPEZ CLAVE: \_\_\_\_\_  
JOSÉ ABRAHAM BALDERAS LÓPEZ \_\_\_\_\_  
GONZALO GALVEZ COYT CLAVE: \_\_\_\_\_  
MARIO CERVANTES CONTRERAS \_\_\_\_\_

**III. DESCRIPCIÓN DEL CONTENIDO DEL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA****III.1 OBJETIVO GENERAL:**

Conocer los fundamentos de la Física Cuántica y aplicarlos a la descripción de fenómenos cuánticos a escala nanométrica

**III.2 DESCRIPCIÓN DEL CONTENIDO**

TEMAS Y SUBTEMAS	TIEMPO
<b>1. FUNDAMENTOS</b>	30
<p>1.1. Postulados básicos de la Mecánica Cuántica. Dualidad onda-partícula. La función de onda y su interpretación.</p> <p>1.2. Formalismo cuántico: variables dinámicas observables, operadores cuánticos, álgebra de operadores, valores propios y funciones propias de un operador, espectro de un operador, valores de expectación, transformadas de Fourier y espacios de configuración y de momentos, relaciones de incertidumbre.</p> <p>1.3. Evolución temporal de las variables dinámicas. Teorema de Ehrenfest. La ecuación de Schrödinger y su solución formal.</p> <p>1.4. Partículas confinadas en 1, 2 y 3 dimensiones. Densidad de estados. Realización práctica de puntos cuánticos (átomos artificiales), de alambres cuánticos y de pozos cuánticos (gas bidimensional de electrones, 2DEG). Tunelamiento en barreras de potencial.</p> <p>1.5. El oscilador armónico en 1, 2 y 3 dimensiones. Realización práctica de osciladores armónicos en moléculas y nanoestructuras. El potencial de Morse en moléculas diatómicas. Partículas sujetas a fuerzas centrales y el momento angular. El rotor rígido y no-rígido y los modos rotacionales de moléculas.</p> <p>1.6. Teoría de momento angular y espín. Adición de momentos angulares. Ecuación de Pauli para partículas de espín <math>\frac{1}{2}</math>. Interacción spin-orbita. El átomo de hidrogeno con interacciones magnéticas de espín. Efecto Zeeman.</p> <p>1.7. Sistemas de muchas partículas. Partículas idénticas indistinguibles. Principio de exclusión de Pauli. Determinantes de Slater. Estadísticas de Fermi-Dirac y de Bose-Einstein.</p> <p>...1.8. Introducción a la Mecánica Cuántica relativista y su aplicación a sistemas atómicos y moleculares. La ecuación de Dirac y los métodos de solución en casos especiales. Electrones en grafeno como ejemplo de un gas bidimensional de fermiones de Dirac sin masa.</p>	
<b>2. MÉTODOS APROXIMADOS EN MECANICA CUANTICA</b>	30

<p>2.1. El método WKB y el método variacional.</p> <p>2.2. Teoría de perturbaciones independientes del tiempo para estados degenerados y no-degenerados.</p> <p>2.3. Teoría de perturbaciones dependientes del tiempo. Transiciones y reglas de selección dipolares.</p> <p>2.4. La aproximación Born-Oppenheimer. Funciones de Green para la solución de la ecuación de Schrödinger de muchos cuerpos. El método de Hartree-Fock de campo auto consistente (HF-SCF) aplicado a la descripción de átomos, moléculas y nanoestructuras. Descripción del algoritmo Hartree-Fock. Ejemplos de aplicación usando software disponible.</p> <p>2.5. El método de la teoría de las funcionales de la densidad (DFT) aplicado a la descripción de átomos, moléculas y nanoestructuras. Los teoremas de Hohenberg-Kohn. Descripción del algoritmo DFT. Ejemplos de aplicación usando software disponible.</p>	
<p><b>3. FISICA ATOMICA Y MOLECULAR</b></p>	<p>24</p>
<p>3.1. Átomos de muchos electrones. El principio Aufbau para la descripción de los elementos de la tabla periódica. Notación espectroscópica para los estados electrónicos. Regla de Hund. Estructura fina e hiperfina de los espectros atómicos. Métodos experimentales para la determinación de la estructura electrónica de los elementos.</p> <p>3.2. Enlace químico entre átomos. La molécula de hidrogeno. Moléculas poliatómicas. Introducción a la teoría de grupos para la descripción de simetrías moleculares. Interpretación y uso de tabla de caracteres de grupos puntuales. El método LCAO y el método de Hückel para la descripción de orbitales moleculares. Espectros rotacionales, roto-vibracionales, vibracionales y electrónicos. Reglas de selección.</p>	
<p><b>4. APLICACIONES EN NANOTECNOLOGIA</b></p>	<p>24</p>
<p>4.1. Interacción de luz con la materia. Breve descripción de la estructura de bandas en sólidos. Absorción y emisión de luz. Semiconductores de banda prohibida directa e indirecta. Excitones. Emisión de luz en pozos y puntos cuánticos. Revisión de artículos selectos en el tema.</p> <p>4.2. Transporte de carga en sistemas de baja dimensionalidad. Teoría de Landauer-Büttiker. Transporte balístico. Localización. Efectos de interferencia. Demostración práctica de la cuantización de la conductancia. Electrónica molecular. Nanotubos de carbono como ejemplos de alambres cuánticos. Revisión de artículos selectos en el tema.</p> <p>4.3. Espintrónica. Sub-bandas magneto-eléctricas en estructuras cuánticas confinadas. Relajación de espines en metales y semiconductores. Transporte de espines en sólidos. Computación cuántica con espines. Revisión de artículos selectos en el tema.</p>	
<p style="text-align: right;">Total</p>	<p>108 h</p>

### III.3 BIBLIOGRAFIA UTILIZADA EN LA ASIGNATURA

Mitin, V. V., Sementsov, D. I., Vagidov, N. Z. Quantum mechanics for nanostructures. Cambridge University Press, 2010, 432 p.

Band, Y. B., Avishai, Y. Quantum mechanics with applications to nanotechnology and information science. Academic Press, 2012, 992 p.

Wolf, E. L. Quantum nanoelectronics. An introduction to electronic nanotechnology and quantum computing. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. Germany, 2009, 456 p.

Nakamura, K., Harayama, T. Quantum chaos and Quantum Dots. Oxford University Press, Great Britain, 2004, 199 p.

Ciftja, O. Quantum dots: Applications, synthesis and characterization (Nanotechnology Science and Technology). Nova Publishers, NY, 2012, 247 p.

Khanna, S. N., Castleman, A. W. (editores). Quantum phenomena in clusters and nanostructures. Springer Verlag, Germany, 2010, 278 p.

Lüth, H. Quantum Physics in the nanoworld: Schrödinger's cat and the dwarfs. Springer Verlag, Germany, 2012, 478 p.

Gasiorowicz, S. Quantum Physics, third edition. Wiley, USA, 2003, 352p.

Sakurai, J. J., Napolitano, J. J. Modern Quantum Mechanics. (2<sup>nd</sup> edition). Addison Wesley, USA, 2010, 550p.

Miller, D. A. B. Quantum Mechanics for Scientists and Engineers. University Cambridge Press, New York, USA, 2008, 574p.

Griffits, D. J. Introduction to Quantum Mechanics (2nd edition). Benjamin Cummings, USA, 2010, 480p.

Shankar, R. Principles of quantum mechanics, second edition. Springer, USA, 1994, 694p.

Vedral, V., Dunningham, J. Introductory Quantum Physics and Relativity. Imperial College Press, England, 2010, 200p.

Krane, K. S. Modern Physics, third edition. Wiley, USA, 2012. 560 p.

Townsend, J. S. Quantum Physics: A fundamental approach to modern Physics. University Science Books, USA, 2009, 510 p.

Thornton, S. T., Rex, A. Modern Physics for Scientists and Engineers, fourth edition . Brooks Cole, USA, 2012, 672p.

Serway, R. A., Moses, C. J., Moyer, C. A. Modern Physics, third edition. Brooks Cole, USA, 2004, 744p.

Eisberg, R., Resnick, R. Quantum Physics of atoms, solids, nuclei and particles, second edition. John Wiley & Sons, USA, 1985, 864p.

Public exhibit for demonstrating the quantum of electrical conductance, E. H. Huisman, F. L. Bakker, J.P. van der Pal, R. M. de Jonge, and C. H. van der Wal, arXiv:1103.3739v2 [physics.pop-ph] 15 Apr 2011, <http://arxiv.org/pdf/1103.3739.pdf>

L.I. Schiff, Quantum Mechanics, McGraw-Hill, N.Y. 1968.

A.C. Phillips, Introduction to Quantum Mechanics, John Wiley & Sons, 2003.

Hendrik F. Hameka, Quantum Mechanics: A Conceptual Approach, John Wiley & Sons, 2004.

H. Haken, H.C. Wolf, The Physics of Atoms and Quanta, 7a edición, Springer, Berlin, Heidelberg 2000.

Bernd Thaller, Visual Quantum Mechanics, Springer-Verlag, 2000.

H. Haken, H.C. Wolf, The Physics of Atoms and Quanta, 7a edición, Springer, 2004.

P.W. Atkins, Molecular Quantum Mechanics, Clarendon Press Oxford, 1970.

H. Haken, H.C. Wolf, Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry, 2a edición, Springer, 2004.

J.C. Slater, Quantum Theory of Molecules and Solids, McGraw-Hill, New York, 1963.

C.A. Coulson, Valence, Oxford University Press, 1972.

I.N. Levine, Quantum Chemistry, Prentice Hall, 1991.

J.M. Thijssen, Computational Physics, Cambridge University Press, 2007.

#### **III.4 PROCEDIMIENTOS O INSTRUMENTOS DE EVALUACIÓN A UTILIZAR**

Evaluación continua. A lo largo del curso el alumno realizará actividades extra clase consistentes en la realización de trabajos de investigación y en la realización de problemas. Además algunos de los temas se expondrán en forma de seminario con posterior discusión. La evaluación continua tendrá un valor del 50% del total de la evaluación.

Evaluación escrita. Dos o tres evaluaciones a lo largo del curso las cuales tendrán un valor del 50 del total de la evaluación.