



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

32523 - FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

Información de la asignatura

Código - Nombre: 32523 - FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

Titulación: 616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013)

651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional

666 - Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional

751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo

762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

Centro: 104 - Facultad de Ciencias

Curso Académico: 2021/22

1. Detalles de la asignatura

1.1. Materia

Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica.

1.2. Carácter

616 - Obligatoria

762 - Obligatoria

666 - Complementos de Formación

651 - Obligatoria

748 - Obligatoria

751 - Obligatoria

1.3. Nivel

616 - Máster (MECES 3)

666 - Doctorado (MECES 4)

762 - Máster (MECES 3)

651 - Máster (MECES 3)

748 - Máster (MECES 3)

751 - Máster (MECES 3)

1.4. Curso

751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo: 1

666 - Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional: 99

651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 1

748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 1

762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021): 1

616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013): 1

1.5. Semestre

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	1/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	1/5	

616-Anual o Primer semestre
666-Anual o Primer semestre
762-Anual o Primer semestre
651-Anual o Primer semestre
748-Anual o Primer semestre
621-Anual
751-Anual o Primer semestre

1.6. Número de créditos ECTS

5.0

1.7. Idioma

Inglés

1.8. Requisitos previos

No hay.

1.9. Recomendaciones

No hay.

1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

1.11. Coordinador/a de la asignatura

Antonio Picon Alvarez

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

1.12.1. Competencias

BÁSICAS Y GENERALES

CB6 – Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

CG01 - Los estudiantes son capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

CG03 - Los estudiantes son capaces de trabajar en equipo tanto a nivel multidisciplinar como con sus propios pares respetando el principio de igualdad de hombre y mujeres.

TRANSVERSALES

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	2/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	2/5	

ESPECÍFICAS

CE01 - Los estudiantes demuestran su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

CE04 - Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados.

CE12 - Está familiarizado con los postulados fundamentales de la Mecánica Cuántica necesarios para un buen entendimiento de los métodos más comunes utilizados en química cuántica.

CE17 - Los estudiantes comprenden y manejan las herramientas matemáticas requeridas para el desarrollo de la Química Teórica en sus aspectos fundamentales y sus aplicaciones.

1.12.2. Resultados de aprendizaje

Comprensión y manejo de las herramientas matemáticas requeridas para el desarrollo de la Mecánica Cuántica en sus aspectos fundamentales y sus aplicaciones.

1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

1.13. Contenidos del programa

Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica

Primera Parte:

- 1- Introducción. Solución de la ecuación de Schrödinger para casos sencillos.
- 2- Álgebra básica.
- 3- Espacios funcionales.
- 4 -Métodos aproximados en Química Cuántica: Principio Variacional y Teoría de Perturbaciones independiente del tiempo.
- 5 -Partículas independientes e idénticas.
- 6- Momento Angular, spin.
- 7- Teoremas principales de la Mecánica Cuántica.
- 8- Composición de momentos angulares.

Segunda Parte:

- 9- Estados puros y estados mezcla.
- 10- Postulados de la mecánica cuántica.
- 11- Observables compatibles e incompatibles.
- 12- Operadores de densidad.
- 13- Imágenes de evolución temporal.
- 14- Teoría de perturbaciones dependientes del tiempo.
- 15- Sistemas compuestos. Correlación y entrelazamiento.
- 16- Representaciones discretas. Cambios de base.
- 17- Representaciones de posiciones y de momentos.
- 18- Formalismo de segunda cuantización.
- 19- Operadores y matrices de densidad reducidos. Espinorbitales naturales.

1.14. Referencias de consulta

a) Nivel básico

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.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	3/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	3/5	

b) Nivel Recomendado

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

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).

2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

2.1. Presencialidad

	# horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	43
Porcentaje de actividades no presenciales	82

2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	31
Seminarios	12
Clases prácticas en aula	
Prácticas clínicas	
Prácticas con medios informáticos	
Prácticas de campo	
Prácticas de laboratorio	
Prácticas externas y/o practicum	
Trabajos académicamente dirigidos	
Tutorías	
Actividades de evaluación	
Otras	

Lección magistral: El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

Docencia en red. Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma Moodle (<https://posgrado.uam.es>).
Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

Seminarios online. Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios online para discutir los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y supervisar la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.

Tutorías. El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.

3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

3.1. Convocatoria ordinaria

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	4/5
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	4/5	

- 60% Entrega de una hoja de ejercicios propuestos.
- 40% Informes sobre los ejercicios hechos en el aula, tutorías y seminarios.

3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	60
Evaluación continua	40

3.2. Convocatoria extraordinaria

El estudiante tendrá que presentar los trabajos que no haya realizado durante el curso o que haya realizado de forma incorrecta. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 100% ejercicios

3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	100
Evaluación continua	

4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	5/5
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	5/5	