

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

<b>Código</b>	43988
<b>Nombre</b>	Fundamentos matemáticos de la mecánica cuántica
<b>Ciclo</b>	Máster
<b>Créditos ECTS</b>	5.0
<b>Curso académico</b>	2022 - 2023

**Titulación(es)**

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1	Facultad de Química	1	Anual
3156 - Química Teórica y Modelización Computacional	Escuela de Doctorado	0	Primer cuatrimestre

**Materias**

Titulación	Materia	Caracter
2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1	1 - Fundamentos	Obligatoria
3156 - Química Teórica y Modelización Computacional	1 - Complementos de Formación	Optativa

**Coordinación**

Nombre	Departamento
SANCHEZ MARIN, JOSE	315 - Química Física
TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

**RESUMEN****CONOCIMIENTOS PREVIOS**



### Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

### Otros tipos de requisitos

No hay requisitos previos.

## COMPETENCIAS

### 2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1

- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- 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.
- Los estudiantes deben ser 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.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante es capaz de resolver problemas y tomar decisiones.
- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto.



## 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.

## DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

### 1. Parte I

- 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.

### 2. Parte II

- 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



## VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	30,00	100
Seminarios	12,00	100
Elaboración de trabajos individuales	30,00	0
Estudio y trabajo autónomo	33,00	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	20,00	0
<b>TOTAL</b>	<b>125,00</b>	

## METODOLOGÍA DOCENTE

**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 (<http://www.uam.es/moodle>). 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.

## EVALUACIÓN

### 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

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

### 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

## REFERENCIAS

### Básicas

- 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)

