

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

Código	44970
Nombre	Fundamentos matemáticos de la mecánica cuántica
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	5.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2245 - Máster Universitario EM en Química Teórica y Modelización Computacional	Facultad de Química	1	Anual

Materias

Titulación	Materia	Carácter
2245 - Máster Universitario EM en Química Teórica y Modelización Computacional	1 - Fundamentos	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

RESUMEN

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

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****COMPETENCIAS (RD 1393/2007) // RESULTADOS DEL APRENDIZAJE (RD 822/2021)****2245 - Máster Universitario EM en Química Teórica y Modelización Computacional**

- 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 demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- El estudiante está familiarizado con los postulados fundamentales de la Mecánica Cuántica necesarios para un buen entendimiento de los métodos más comunes utilizados en química cuántica.
- 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.
- 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.
- El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.
- El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.



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

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (RD 1393/2007) // SIN CONTENIDO (RD 822/2021)

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.

- 1- Introducción. Solución de la ecuación de Schrödinger para casos sencillos.
- 2- Algebra 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.

- 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	31,00	100
Seminarios	12,00	100
TOTAL	43,00	

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 (<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.

EVALUACIÓN



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

- 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.

Complementarias

- 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).

