



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:** 2024/25

### 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

Anual

#### 1.6. Número de créditos ECTS

5.0

|                                       |  |                |            |     |
|---------------------------------------|--|----------------|------------|-----|
| <b>Código Seguro de Verificación:</b> |  | <b>Fecha:</b>  | 08/07/2024 | 1/4 |
| <b>Firmado por:</b>                   | <i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i> |                |            |     |
| <b>Url de Verificación:</b>           |  | <b>Página:</b> | 1/4        |     |

## 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 Picón - Universidad Autónoma de Madrid.

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

## 1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

### 1.12.1. Competencias / Resultados del proceso de formación y aprendizaje

#### 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.

#### 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

|                                       |  |                |            |     |
|---------------------------------------|--|----------------|------------|-----|
| <b>Código Seguro de Verificación:</b> |  | <b>Fecha:</b>  | 08/07/2024 | 2/4 |
| <b>Firmado por:</b>                   | <i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i> |                |            |     |
| <b>Url de Verificación:</b>           |  | <b>Página:</b> | 2/4        |     |

aspectos fundamentales y sus aplicaciones.

### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

### 1.13. Contenidos del programa

- 1- Introducción. Solución de la ecuación de Schrödinger para casos sencillos.
- 2- Álgebra básica.
- 3- Espacios funcionales.
- 4- Representaciones discretas. Cambios de base.
- 5- Representaciones de posiciones y de momentos.
- 6- Métodos aproximados en Química Cuántica: Principio Variacional y Teoría de Perturbaciones independiente del tiempo.
- 7- Partículas independientes e idénticas.
- 8- Estados puros y estados mezcla.
- 9- Operadores de densidad.
- 10- Operadores y matrices de densidad reducidos. Espinorbitales naturales
- 11- Teoremas principales de la Mecánica Cuántica.
- 12- Postulados de la mecánica cuántica.
- 13- Observables compatibles e incompatibles.
- 14- Sistemas compuestos. Correlación y entrelazamiento.
- 15- Imágenes de evolución temporal.
- 16- Teoría de perturbaciones dependientes del tiempo.
- 17- Momento Angular, spin.
- 18- Composición de momentos angulares
- 19- Formalismo de segunda cuantización.

### 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.

#### 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      |

|                                |  |         |            |     |
|--------------------------------|--|---------|------------|-----|
| Código Seguro de Verificación: |  | Fecha:  | 08/07/2024 | 3/4 |
| Firmado por:                   | <i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i> |         |            |     |
| Url de Verificación:           |  | Página: | 3/4        |     |

## 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

- 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:  | 08/07/2024 | 4/4 |
| Firmado por:                   | <i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i> |         |            |     |
| Url de Verificación:           |  | Página: | 4/4        |     |