



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica / [Mathematical Foundations of Quantum Mechanics](#)

1.1. Código / Course number

32523

1.2. Materia / Content area

Módulo 1. Fundamentos / [Module 1. Fundamental Course](#)

1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / Semester

2º / [2nd](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / Minimum attendance requirement

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Jesús González Vázquez (Coordinador)

Departamento de Química/ **Department of Chemistry**

Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**

Universidad Autónoma de Madrid

Despacho - Módulo / **Office - Module**: Módulo 13-308

Teléfono / **Phone**: +34 91 497 3008

Correo electrónico/**Email**: jesus.gonzalezv@uam.es

Página web/**Website**:

<https://moodle.uam.es/>

Horario de atención al alumnado/**Office hours**:

Consulta por internet o concretar cita con el profesor por email

Ask the teacher by email to make an appointment

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Fernando Martín García

Departamento de Química / **Department of Chemistry**

Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**

Universidad Autónoma de Madrid

Despacho - Módulo / **Office - Module**: Modulo 13-304

Teléfono / **Phone**: +34 914974019

Correo electrónico/**Email**: fernando.martin@uam.es

Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del aprendizaje

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

1.11b. Competencias

Estos resultados del aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias del curso:

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.



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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.



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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

1.11a. Learning objectives

To understand the mathematical tools needed to develop the main methods in Quantum Mechanics and to understand the main concepts and applications.

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG02 - Students are able to solve problems and make decisions of any kind under the commitment to the defense and practice of equality policies.

CG03 - Students are able to work as a team both at multidisciplinary level and with their own peers respecting the principle of equality of men and women.



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

CT02 - Students are organized at work demonstrating that they know how to manage their time and resources.

SPECIFIC SKILLS

CE01- Students demonstrate their knowledge and understanding of the facts applying concepts, principles and theories related to the Theoretical Chemistry and Computational Modeling.

CE04 - Students understand the theoretical and practical bases of computational techniques with which they can analyze the electronic, morphological and structural structure of a compound and interpret the results adequately.

CE12 - Students are familiar with the fundamental postulates of Quantum Mechanics necessary for a good understanding of the most common methods used in quantum chemistry.

CE17 - Students understand and manage the mathematical tools required for the development of theoretical chemistry both in fundamental aspects and applications.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica

Primera Parte

- 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.

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



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

- 17- Representaciones de posiciones y de momentos
- 18- Formalismo de segunda cuantización
- 19- Operadores y matrices de densidad reducidos. Espinorbitales naturales

Mathematical Foundations of Theoretical Chemistry

Part I

- 1 - Introduction. Solution of Schrödinger equation in simple systems
- 2 - Basic algebra
- 3 - Functional Spaces
- 4 - Approximate Methods in Quantum Chemistry: Variational Principle and Time-independent Perturbation Theory
- 5 - Independent and Identical Particles
- 6 - Angular momentum, spin.
- 7 - Main theorems in Quantum Mechanics
- 8 - Composition of Angular Momenta.

Part II

- 9- Pure states and mixed states
- 10- Postulates of Quantum Mechanics
- 11- Compatible and incompatible observables
- 12- Density operators
- 13- Time evolution pictures
- 14- Time dependent perturbation theory
- 15- Compound systems. Correlation and entanglement
- 16- Discrete representations. Basis changes
- 17- Position and momentum representations
- 18- Second quantization formalism
- 19- Reduced density operators and matrices. Natural spinorbitals

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

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)



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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)

2. Métodos docentes / **Teaching methodology**

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



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
 Código: 32523
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Obligatoria
 N° de créditos: 5 ECTS

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.

Lecture: The Professor will deliver lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

Online Seminars: After the lecturing period, online seminars between the Professor and the students will be arranged at the *virtual classroom* in order to discuss the results being obtained, the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports.

Tutoring sessions: The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual31 horas
 Seminarios.....12 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....32 horas
 Preparación de seminarios.....20 horas
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....30 horas

TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS).....125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom31 hours
 Seminars.....12 hours

Independent study hours:

self-study or group study32 hours
 Preparation of seminars, assigned tasks and study.....20 hours



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....30 hours
TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS).....125 hours

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

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

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 60% from a set of proposed exercises.
- 40% from the student reports, discussions between the student and professor in tutoring session and seminars.

Extraordinary assessment

The student will have to repeat those exercises not presented during the course and repeat those incorrectly done. The student will also do a final exam. The student mark will be obtained from:

- 100% from the student exercises presented and discussions between the student and the teachers.

Curso 2018-2019



Asignatura: Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica
Código: 32523
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

5. Cronograma* / **Course calendar**

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.
[Please, check the official schedule posted on the master website.](#)

*Este cronograma tiene carácter orientativo

[*This course calendar is orientative](#)