



FICHA IDENTIFICATIVA

Datos de la Asignatura

Código	43990
Nombre	Simetría en átomos, moléculas y sólidos
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	5.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2184 - Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional	Facultad de Química	1	Anual
3156 - Doct. Química Teórica y Modelización Comput.	Escuela de Doctorado	0	Primer cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Carácter
2184 - Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional	1 - Fundamentos	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
SANCHEZ MARIN, JOSE	315 - Química Física
TUÑON 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 (RD 1393/2007) // RESULTADOS DEL APRENDIZAJE (RD 822/2021)

2184 - Máster Universitario 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 es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante posee la base matemática necesaria para el correcto tratamiento de la simetría en átomos, moléculas y sólidos, con énfasis en las posibles aplicaciones.
- El estudiante comprende y maneja 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)

Dotar al alumno de la base matemática necesaria para el correcto tratamiento de la simetría en átomos, moléculas y sólidos, con énfasis en las posibles aplicaciones.



DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Teoría de grupos y simetría

- Introducción a la teoría de grupos abstractos
- Introducción a la teoría de representaciones
- Representaciones matriciales de grupos de simetría
- Representaciones irreducibles

2. Simetría en moléculas

- Grupos y representaciones en mecánica cuántica
- Aplicaciones de la teoría de grupos en química cuántica
- Grupo de rotaciones $SO(3)$

3. Simetría en Sólidos

- Grupos espaciales
- Estructuras isotropas y anisotropas
- Red recíproca de una red de Bravais.
- Aplicación a funciones de onda electrónicas

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	20,00	100
Seminarios	20,00	100
Elaboración de trabajos individuales	30,00	0
Estudio y trabajo autónomo	35,00	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	20,00	0
TOTAL	125,00	

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 (<http://www.uam.es/moodle>). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.



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

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.

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 los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso además de test llevados a cabo a mitad y final del curso. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- 50 % Simetría en átomos y moléculas
- resolución de problemas de carácter práctico y/o teórico relacionados con la asignatura que se especificarán durante el curso.
- 50 % Simetría en sólidos cristalinos
- 30% realización de resolución de 2 problemas estándar relacionados con la asignatura y que se entregarán durante el curso intensivo
- 20% realización de 1 ejercicio avanzados a llevar a cabo con ordenador usando un código libre para el cálculo de estructuras de bandas así como herramientas disponibles en internet (servidor de cristalografía de Bilbao).

Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 70% el examen final,
- 30% Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.



REFERENCIAS

Básicas

- Charles C. Pinter A Book of Abstract Algebra, Dover, (New York) 2010
- Roy Mc Weeny Symmetry. An Introduction to Group Theory and its Applications, Dover (New York) 2002
- Philip R. Bunker Molecular Symmetry and Spectroscopy, Academic Press (London) 1979
- D.M. Bishop, Group Theory and Chemistry. Clarendon Press (New York) 1973
- M. Tinkham. Group Theory and Quantum Mechanics. MacGraw Hill (New York) 1974
- Dove, Structure and Dynamics. Oxford University Press (Oxford) 2003
- C. Hammond. The Basics of Crystallography and Diffraction. Oxford University Press (Oxford) 2001
- C. Kittel. Introduction to Solid State Physics. Wiley (New York) 2004
- N.W. Ashcroft y N.D. Mermin. Solid State Physics. Saunders College () 1976
- M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus y A. Jorio, Group Theory: Applications to the Physics of Condensed Matter, Springer (2008)