

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

Código	44972
Nombre	Simetría en átomos, moléculas y sólidos
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	5.0
Curso académico	2021 - 2022

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2245 - M.ErasmMund en Química Teórica y Modelización Computacional	Facultad de Química	1	Anual

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2245 - M.ErasmMund en Química Teórica y Modelización Computacional	1 - Fundamentos	Obligatoria

Coordinación

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

RESUMEN

El objetivo de esta asignatura es el de 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.

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

2245 - M.ErasmMund 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/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.
- El/la estudiante posee la base matemática necesaria para el correcto tratamiento de la simetría en átomos, moléculas y sólidos, con énfasis en las posibles aplicaciones.
- 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

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 isótropas y anisótropas
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
TOTAL	40,00	

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

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

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
- D. Schonland, Molecular Symmetry. An introduction to Group Theory and it uses in Chemistry, Van Nostrand 1965
- 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)

ADENDA COVID-19

Esta adenda solo se activará si la situación sanitaria lo requiere y previo acuerdo del Consejo de Gobierno