

## GUÍA DOCENTE ABREVIADA DE LA ASIGNATURA

### 411 - Simetría en Átomos, Moléculas y Sólidos

#### Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional

Curso Académico 2023-2024

1. DATOS IDENTIFICATIVOS					
Título/s	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional			Tipología v Curso	Obligatoria. Curso 1
Centro	Facultad de Ciencias				
Módulo / materia	MÓDULO 1: FUNDAMENTOS				
Código y denominación	411 - Simetría en Átomos, Moléculas y Sólidos				
Créditos ECTS	5	Cuatrimestre	Anual		
Web	<a href="https://moodle.uam.es/course/view.php?id=29724">https://moodle.uam.es/course/view.php?id=29724</a>				
Idioma de impartición	Español	English friendly	Sí	Forma de impartición	Presencial

Departamento	DPTO. CIENCIAS DE LA TIERRA Y FISICA DE LA MATERIA CONDENSADA				
Profesor responsable	PABLO GARCIA FERNANDEZ				
E-mail	pablo.garciafernandez@unican.es				
Número despacho	Facultad de Ciencias. Planta: + 2. DESPACHO PROFESORES (2007)				
Otros profesores	IGNACIO SOLÁ REIJA				

### 3.1 RESULTADOS DE APRENDIZAJE

-- Alcanzar las competencias generales y específicas de la materia y adquirir los conocimientos teóricos y prácticos descritos en sus contenidos.

Desarrollar las competencias de carácter personal, interpersonal y vinculado al desarrollo ético y responsable de la profesión.

#### 4. OBJETIVOS

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.

##### 1. Teoría de Grupos y simetría

- Simetría en la ciencia
- Isometrías del espacio euclídeo
- 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

##### 3. Simetría en Sólidos

- Grupos espaciales
- Estructuras isótropas y anisótropas
- Red recíproca de una red de Bravais.
- Aplicación sobre funciones de onda electrónicas

#### 6. ORGANIZACIÓN DOCENTE

##### CONTENIDOS

1	Grupos puntuales - Simetría en Moléculas (Universidad de Barcelona) <ul style="list-style-type: none"> <li>- Álgebra de grupos</li> <li>- Operaciones de simetría</li> <li>- Clasificación moléculas</li> <li>- Representación matricial</li> <li>- Caracteres y clases</li> <li>- Representaciones irreducibles</li> <li>- Grupo de rotaciones</li> </ul>
2	Grupos espaciales - Simetría en Sólidos: (Universidad de Cantabria) <ul style="list-style-type: none"> <li>- Grupos espaciales</li> <li>- Estructuras isótropas y anisótropas</li> <li>- Red recíproca de una red de Bravais.</li> <li>- Aplicación sobre funciones de onda electrónicas</li> </ul>

7. MÉTODOS DE LA EVALUACIÓN				
Descripción	Tipología	Eval. Final	Recuper.	%
Resolución ejercicios propuestos (simetría cristales)	Trabajo	No	Sí	30,00
Resolución ejercicios computacionales (simetría cristales)	Trabajo	No	Sí	20,00
Resolución problemas simetría puntual	Trabajo	No	No	50,00
TOTAL				100,00
Observaciones				
<p>En la convocatoria de Septiembre se realizará un examen final único que será de carácter teórico y práctico, y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La parte práctica constará de un trabajo individual que tiene que realizar el estudiante con los programas utilizados a lo largo del curso. La puntuación en la convocatoria extraordinaria seguirá los porcentajes: 70 % el examen teórico, 30 % el trabajo individual.</p>				
Criterios de evaluación para estudiantes a tiempo parcial				
En el caso de los estudiantes a tiempo parcial se flexibilizará las fechas de entrega para adaptarse a su dedicación.				

8. BIBLIOGRAFÍA Y MATERIALES DIDÁCTICOS
BÁSICA
<p>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            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)</p>

Esta es la Guía Docente abreviada de la asignatura. Tienes también publicada en la Web la información más detallada de la asignatura en la Guía Docente Completa.