

Facultad de Ciencias

## GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA

411 - Simetría en Átomos, Moléculas y Sólidos

Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional  
Obligatoria. Curso 1

Curso Académico 2023-2024

### 1. DATOS IDENTIFICATIVOS

Título/s	Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional	Tipología y 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: + 3. DESPACHO PROFESORES (3008)
Otros profesores	IGNACIO SOLÁ REIJA

### 2. CONOCIMIENTOS PREVIOS

Algebra lineal a nivel de grado. Un conocimiento básico de mecánica cuántica (forma de las funciones de onda electrónicas en átomos, moléculas y sólidos).

### 3. COMPETENCIAS GENÉRICAS Y ESPECÍFICAS DEL PLAN DE ESTUDIOS TRABAJADAS

<b>Competencias Genéricas</b>
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
<b>Competencias Específicas</b>
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.
<b>Competencias Básicas</b>
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
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
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
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
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
<b>Competencias Transversales</b>
El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.
El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.

#### 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

**5. MODALIDADES ORGANIZATIVAS Y MÉTODOS DOCENTES**

ACTIVIDADES	HORAS DE LA ASIGNATURA
<b>ACTIVIDADES PRESENCIALES</b>	
HORAS DE CLASE (A)	
- Teoría (TE)	30
- Prácticas en Aula (PA)	20
- Prácticas de Laboratorio Experimental(PLE)	
- Prácticas de Laboratorio en Ordenador (PLO)	
- Prácticas Clínicas (CL)	
Subtotal horas de clase	50
<b>ACTIVIDADES DE SEGUIMIENTO (B)</b>	
- Tutorías (TU)	10
- Evaluación (EV)	10
Subtotal actividades de seguimiento	20
<b>Total actividades presenciales (A+B)</b>	<b>70</b>
<b>ACTIVIDADES NO PRESENCIALES</b>	
Trabajo en grupo (TG)	17
Trabajo autónomo (TA)	38
Tutorías No Presenciales (TU-NP)	
Evaluación No Presencial (EV-NP)	
<b>Total actividades no presenciales</b>	<b>55</b>
<b>HORAS TOTALES</b>	<b>125</b>

**6. ORGANIZACIÓN DOCENTE**

CONTENIDOS		TE	PA	PLE	PLO	CL	TU	EV	TG	TA	TU-NP	EV-NP	Semana
1	Grupos puntuales - Simetría en Moléculas (Universidad de Barcelona) - Álgebra de grupos - Operaciones de simetría - Clasificación moléculas - Representación matricial - Caracteres y clases - Representaciones irreducibles - Grupo de rotaciones	15,00	10,00	0,00	0,00	0,00	5,00	5,00	8,50	19,00	0,00	0,00	2
2	Grupos espaciales - Simetría en Sólidos: (Universidad de Cantabria) - Grupos espaciales - Estructuras isótropas y anisótropas - Red recíproca de una red de Bravais. - Aplicación sobre funciones de onda electrónicas	15,00	10,00	0,00	0,00	0,00	5,00	5,00	8,50	19,00	0,00	0,00	2
<b>TOTAL DE HORAS</b>		<b>30,00</b>	<b>20,00</b>	<b>0,00</b>	<b>0,00</b>	<b>0,00</b>	<b>10,00</b>	<b>10,00</b>	<b>17,00</b>	<b>38,00</b>	<b>0,00</b>	<b>0,00</b>	

Esta organización tiene carácter orientativo.

TE	Horas de teoría
PA	Horas de prácticas en aula
PLE	Horas de prácticas de laboratorio experimental
PLO	Horas de prácticas de laboratorio en ordenador
CL	Horas de prácticas clínicas
TU	Horas de tutoría
EV	Horas de evaluación
TG	Horas de trabajo en grupo
TA	Horas de trabajo autónomo
TU-NP	Tutorías No Presenciales
EV-NP	Evaluación No Presencial

## 7. MÉTODOS DE LA EVALUACIÓN

Descripción	Tipología	Eval. Final	Recuper.	%
Resolución ejercicios propuestos (simetría cristales)	Trabajo	No	Sí	30,00
Calif. mínima	0,00			
Duración				
Fecha realización	Curso intensivo (enero 2017)			
Condiciones recuperación				
Observaciones				
Resolución ejercicios computacionales (simetría cristales)	Trabajo	No	Sí	20,00
Calif. mínima	0,00			
Duración				
Fecha realización	mayo 2017			
Condiciones recuperación				
Observaciones				
Resolución problemas simetría puntual	Trabajo	No	No	50,00
Calif. mínima	0,00			
Duración				
Fecha realización	1/3/2020			
Condiciones recuperación				
Observaciones				
<b>TOTAL</b>				<b>100,00</b>
<b>Observaciones</b>				
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.				
<b>Criterios de evaluación para estudiantes a tiempo parcial</b>				
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

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)

Complementaria

## 9. SOFTWARE

PROGRAMA / APLICACIÓN	CENTRO	PLANTA	SALA	HORARIO
Bilbao crystallographic server ( <a href="http://www.cryst.ehu.es/">http://www.cryst.ehu.es/</a> )				

## 10. COMPETENCIAS LINGÜÍSTICAS

- |  |  |
|--|--|
| <input checked="" type="checkbox"/> Comprensión escrita                            | <input checked="" type="checkbox"/> Comprensión oral |
| <input checked="" type="checkbox"/> Expresión escrita                              | <input checked="" type="checkbox"/> Expresión oral   |
| <input checked="" type="checkbox"/> Asignatura íntegramente desarrollada en inglés |  |

**Observaciones**