



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

## 32525 - SIMETRÍA EN ÁTOMOS, MOLÉCULAS Y SÓLIDOS

### Información de la asignatura

**Código - Nombre:** 32525 - SIMETRÍA EN ÁTOMOS, MOLÉCULAS Y SÓLIDOS

**Titulación:** 616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013)  
651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional  
748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional  
751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo  
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

**Centro:** 104 - Facultad de Ciencias

**Curso Académico:** 2021/22

### 1. Detalles de la asignatura

#### 1.1. Materia

Simetría en átomos, moléculas y sólidos.

#### 1.2. Carácter

Obligatoria

#### 1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

#### 1.4. Curso

1

#### 1.5. Semestre

616-Anual o Primer semestre  
762-Anual o Primer semestre  
651-Anual o Primer semestre  
748-Anual o Primer semestre  
621-Anual  
751-Anual o Primer semestre

#### 1.6. Número de créditos ECTS

5.0

#### 1.7. Idioma

English

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	05/07/2021	1/4
<b>Firmado por:</b>	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	1/4	

## 1.8. Requisitos previos

No hay.

## 1.9. Recomendaciones

No hay.

## 1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

## 1.11. Coordinador/a de la asignatura

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

## 1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

---

### 1.12.1. Competencias

#### 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.

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.

#### TRANSVERSALES

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

#### ESPECÍFICAS

CE11 - 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.

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

### 1.12.2. 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.

### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

## 1.13. Contenidos del programa

### 1. Teoría de Grupos y simetría

- Introducción a la teoría de grupos abstractos
- Introducción a la teoría de representaciones

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	05/07/2021	2/4
<b>Firmado por:</b>	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	2/4	

- 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

### 1.14. Referencias de consulta

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)

## 2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

### 2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	40
Porcentaje de actividades no presenciales	85

### 2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	20
Seminarios	20
Clases prácticas en aula	
Prácticas clínicas	
Prácticas con medios informáticos	
Prácticas de campo	
Prácticas de laboratorio	
Prácticas externas y/o practicum	
Trabajos académicamente dirigidos	
Tutorías	
Actividades de evaluación	
Otras	

**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>).

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	05/07/2021	<b>3/4</b>
<b>Firmado por:</b>	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	3/4	

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.

### 3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

#### 3.1. 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).

##### 3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	
Evaluación continua	

#### 3.2. 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.

##### 3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	70
Evaluación continua	30

### 4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	05/07/2021	4/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/4	