



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Simetría en átomos, moléculas y sólidos / [Symmetry in atoms, molecules and solids](#)

1.1. Código / Course number

32525

1.2. Materia / Content area

Módulo 1. Fundamentos / [Module 1. Fundamental Course](#)

1.3. Tipo / Course type

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / Year

1º / [1st](#)

1.6. Semestre / Semester

2º / [2nd](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / Minimum attendance requirement

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Pablo Garcia Fernandez (Coordinador/**Coordinator**)
Departamento de Ciencias de la Tierra y física de la materia condensada/
Department of Earth Sciences and Solid State Physics
Universidad de Cantabria / **University of Cantabria**
Teléfono / **Phone**: 942202069
Correo electrónico/**Email**: garciapa@unican.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Jesús Aldegunde
Departamento de / **Department of Chemical-Physics**
Universidad de / **University of Salamanca**
Despacho - Módulo / **Office - Module**:
Teléfono / **Phone**: +34 670547267
Correo electrónico/**Email**: jalde@usal.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

1.11. Objetivos del curso / Course objectives

1.11a. Resultados del 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.

1.11b. Competencias

Estos resultados del aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias del curso:

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.



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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.

1.11a. Learning objectives

To provide the students with the mathematical background necessary to adequately treat the symmetry in atoms, molecules and solids with special emphasis in posible applications.

1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

BASIC AND GENERAL SKILLS

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

SPECIFIC SKILLS

CE11 - Students possess the necessary mathematical basis for the correct treatment of the symmetry in atoms, molecules and solids, with emphasis in the possible applications.

CE17 - Students understand and manage the mathematical tools required for the development of theoretical chemistry both in fundamental aspects and applications.

1.12. Contenidos del programa / Course contents

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



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

1. Group theory and symmetry
 - Introduction to abstract group theory
 - Introduction to representation theory
 - Matrix representations of symmetry groups
 - Irreducible representations

2. Symmetry in molecules
 - Groups and representations in quantum mechanics
 - Application of group theory in quantum chemistry
 - Rotation group $SO(3)$

3. Symmetry in solids
 - Space-group symmetry
 - Isotropic and anisotropic structures
 - Reciprocal lattice of a Bravais lattice
 - Application to electronic wavefunctions

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

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 its 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)



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos
 Código: 32525
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Obligatoria
 N° de créditos: 5 ECTS

2. Métodos docentes / Teaching methodology

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.

Lecture: The Professor will deliver lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

Network teaching: All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

Tutoring sessions: The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

Online Seminars: After the lecturing period, online seminars between the Professor and the students will be arranged at the *virtual classroom* in order to discuss the results being obtained, the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

Presencial:

Clases teóricas en aula / aula virtual.....20 horas
 Seminarios.....20 horas

No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....35 horas



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos
 Código: 32525
 Centro: Facultad de Ciencias
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
 Nivel: Máster
 Tipo: Formación Obligatoria
 N° de créditos: 5 ECTS

Preparación de seminarios.....20 horas
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....30 horas
 TOTAL (5 ECTS * 25 horas/ECTS).....125 horas

Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom20 hours
 Seminar.....20 hours

Independent study hours:

self-study or group study35 hours
 Preparation of seminars, assigned tasks and study.....20 hours
 Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....30 hours
 TOTAL (5 ECTS * 25 hours/ECTS).....125 hours

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

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:



Asignatura: Simetría en átomos, moléculas y sólidos
Código: 32525
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional
Nivel: Máster
Tipo: Formación Obligatoria
Nº de créditos: 5 ECTS

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

Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course and tests carried out mid-semester and at the end of the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 50 % Symmetry in atoms and molecules
 - Resolution of problems that will be specified throughout the course. The problems will be of mixed nature, involving both practical and theoretical aspects.
- 50 % Symmetry in solids
 - 30% solution of 2 standard problems associated to the theory provided before the intensive course and to be handed out during the intensive course.
 - 20% solution of an advanced exercise using computational resources, both a program to calculate band structures and the Bilbao crystallographic server

Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The student mark will be obtained from:

- 70% from the final exam,
- 30% from the individual work.

5. Cronograma* / Course calendar

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.
Please, check the official schedule posted on the master website.

*Este cronograma tiene carácter orientativo

*This course calendar is orientative