



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE
MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS



Programa de actividad académica

Nombre de la asignatura: Simetría Molecular II				
Clave:	Semestre:	Campo de conocimiento: Química	No. Créditos: 6	
Carácter: Optativa	Horas por semana		Total horas/ semana	Total horas/ semestre
Tipo: Teórico	Teoría:	Práctica:	3	48
	3			
Modalidad: CURSO		Duración del programa: 16 semanas		

Actividad académica con seriación antecedente:
Objetivo general: Introducir al estudiante los fundamentos de grupos continuos y sus álgebras.
Objetivos específicos: Analizar los sistemas cuánticos desde el punto de vista de las herramientas que ofrecen la teoría de grupos continuos y sus álgebras.

Índice temático			
Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Grupo de Rotaciones-Reflexiones en el Plano 1. Rotaciones puras: $SO(2)$ 2. Grupo completo de transformaciones ortogonales: $O(2)$ 3. Correspondencia con los grupos $C_{\infty v}$ y $D_{\infty h}$ 4. Aplicaciones a moléculas lineales	3	
2	Momento Angular 1. Rotaciones en tres dimensiones 2. Teoría general del momento angular 3. Representación en coordenadas de los estados (l, m) 4. Representaciones del grupo $SO(3)$ 5. Sistemas de laboratorio y rotado 6. Teorema de adición de armónicos esféricos 7. Desarrollo de ondas planas en armónicos esféricos	6	
3	Grupos $SO(3)$ y $SU(2)$ 1. Grupo unimodular bidimensional $U(2)$ 2. Homomorfismo con el grupo $SO(3)$ 3. Representaciones irreducibles de $SU(2)$ y $SO(3)$ 4. Caracteres simples 5. Reducción de productos de Kronecker de representaciones irreducibles de $SO(3)$ 6. Operadores tensoriales y teorema de Wigner-Eckart 7. Rotor Rígido	7.5	
4	Momento Angular de un Campo Vectorial 1. Operador de rotaciones para campos vectoriales 2. Armónicos esféricos espinoriales 3. Coeficientes de Racah 4. Aplicaciones en el cálculo de elementos de matriz 5. Simetría asociada a la inversión temporal 6. Grupos dobles 7. Desdoblamiento de niveles atómicos en campos cristalinos	7.5	

5	Grupos Continuos 1. Grupos de Lie 2. Ejemplos de grupos de Lie 3. Transformaciones infinitesimales 4. Constantes de Estructura 5. Álgebra de Lie 6. Representaciones irreducibles de grupos de Lie. Operadores de Casimir	12	
6	Teoría de Grupos y Espectroscopía Atómica 1. Hamiltoniano en el espacio de configuración 2. Segunda cuantización 3. Grupo unitario $U(n)$ 4. Modelo de capas atómico 5. Configuración p^N 6. Configuración $(s+p)^N$	12	
Total de horas teóricas:		48	
Total de horas prácticas:			
Suma total de horas:		48	

Bibliografía básica actualizada:

1. Chacón, E. *Introducción a la Teoría de Grupos y sus Aplicaciones a la Mecánica Cuántica*. IFUNAM 75-405, 1975.
2. Chen, Jin-Quan. *Group Representation Theory for Physicists*. World Scientific, 1989.
3. Hamermesh, Morton. *Group Theory and its Application to Physical Problems*. Addison-Wesley, 1962.
4. Tinkham, Michael. *Group Theory and Quantum Mechanics*. McGraw-Hill Publishing Company, 1964.
5. Wybourne, B. G. *Classical Groups for Physicists*. J. Wiley & Sons, 1974.

Bibliografía complementaria:

1. Gilmore, R. *Lie Groups, Lie Algebras, and some of their Applications*. Dover Publications, INC, NewYork, 2002.
2. Bunker, P. R. y Jensen, P. *Molecular Symmetry and Spectroscopy*. NRC Research Press, Ottawa 1998.
3. Bunker, P. R. y Jensen, P. *Fundamentals of Molecular Spectroscopy*. Institute of Physics. Series in Chemical Physics. New York, 2005.
4. B.S. Tsukerblat, *Group Theory in Chemistry and Spectroscopy*. A simple guide to advanced usage. Academic Press. New York, 1994.

Sugerencias didácticas:

Exposición oral	()
Exposición audiovisual	()
Ejercicios dentro de clase	(X)
Ejercicios fuera del aula	(X)
Seminarios	()
Lecturas obligatorias	()
Trabajo de investigación	()
Prácticas de taller o laboratorio	()
Prácticas de campo	()
Otras: _____	()

Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:

Exámenes parciales	(X)
Examen final escrito	(X)
Trabajos y tareas fuera del aula	(X)
Exposición de seminarios por los alumnos	()
Participación en clase	()
Asistencia	()
Seminario	()
Otras:	()