



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



Programa de actividad académica

Nombre de la asignatura: Simetría en sistemas cristalinos				
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
		3		
Modalidad: CURSO		Duración del programa: semanas 16		

Actividad académica con seriación antecedente:
Objetivo general: Adquirir los conocimientos que permitan tomar ventaja de la existencia de la simetría en sistemas cristalinos.
Objetivos específicos: Aprender las técnicas matemáticas para el análisis de cristalografía y teoría de bandas desde el punto de vista de la simetría.

Índice temático			
Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Fundamentos de Teoría de Grupos 1. Definición 2. Subgrupos 3. Clases de conjugación 4. Subgrupos invariantes 5. Producto directo	3	
2	Grupos Puntuales Cristalográficos 1. Grupos de simetría 2. Clases 3. Grupos puntuales con rotaciones puras 4. Grupos completos	3	
3	Representaciones 1. Definición de representación 2. Representaciones matriciales de los grupos cristalográficos 3. Relaciones de ortogonalidad 4. Construcción de representaciones 5. Teoría de grupos y mecánica cuántica	6	
4	Grupos Traslacionales 1. Definición de Malla 2. Celda unidad primitiva 3. Rotaciones compatibles con la traslación 4. Sistemas cristalinos 5. Redes de Bravais 6. Celda de Wigner-Seitz 7. Notación Internacional	3	
5	Grupos Espaciales 1. Operadores de Seitz 2. Operaciones no simórficas 3. Estructura de los grupos espaciales 4. Nomenclatura de los grupos espaciales 5. Grupos simórficos	6	

	6. Grupos no simórficos		
	Tablas Cristalográficas		
6	<ol style="list-style-type: none"> Nombre, elementos de simetría y generadores Posiciones Proyecciones, subgrupos maximales y supergrupos minimales Grupos y estructura cristalina 	6	
7	Espectro Vibracional de Moléculas y Iones Complejos en Cristales <ol style="list-style-type: none"> Modos normales Grupo traslacional Clasificación de los movimientos de un cristal Análisis del grupo factor: Espinelas Reglas de selección Análisis del grupo de sitio 	6	
8	Vibraciones en Sistemas Periódicos <ol style="list-style-type: none"> Grupo especial p1 Cadena lineal monoatómica Vibraciones en cristales. Coordenadas cartesianas Coordenadas internas Cadena lineal diatómica 	3	
9	Simetría y Teoría de Bandas <ol style="list-style-type: none"> Espacio recíproco Funciones periódicas Bandas de energía Representación de grupos espaciales Propiedades de $E(k)$ Bandas en semiconductores Métodos de cálculo de estructura de bandas 	6	
10	Propiedades Cristalinas <ol style="list-style-type: none"> Propiedades termodinámicas de equilibrio Cantidades físicas tensoriales Simetría y propiedades físicas Análisis de propiedades Grupos magnéticos Propiedades Magnéticas especiales 	6	
Total de horas teóricas:		48	
Total de horas prácticas:			
Suma total de horas:		48	

Bibliografía básica actualizada:

- Altmann Simon L. *Band Theory of Solid: An Introduction from the Point of View of Symmetry*. Oxford Science Publications, 1991.
- Altmann Simon L. *Induced Representations in Crystals and Molecules. Point, space and nonrigid molecule groups*. Academic Press, 1977.
- Bishop, David M. *Group Theory and Chemistry*. Dover Publications, Inc., New York, 1973.
- Burns, G. y Glazer, A.M. *Space Groups for Solid State Scientist*. Second Edition. Academic Press, 1990.
- Chen, Jin-Quan. *Group Representation Theory for Physicists*. World Scientific, 1989.
- Ferraro, J.R. y Ziemeck, J.S. *Introductory Group Theory and its Applications to Molecular Symmetry*. Plenum Press, 1975.
- Hamermesh, Morton. *Group Theory and its Application to Physical Problems*. Addison-Wesley, 1962.
- Tinkham, Michael. *Group Theory and Quantum Mechanics*. McGraw-Hill Publishing Company, 1964.

Bibliografía complementaria:

- Bunker, P.R. y Jensen, P. *Molecular Symmetry and Spectroscopy*. NRC Research Press, Ottawa 1998.
- Bunker, P.R. y Jensen, P. *Fundamentals of Molecular Spectroscopy*. Institute of Physics. Series in Chemical Physics. New York, 2005.
- B.S. Tsukerblat, *Group Theory in Chemistry and Spectroscopy*. A simple guide to advanced usage. Academic Press. New York, 1994.

Sugerencias didácticas:		Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:	
Exposición oral	<input checked="" type="checkbox"/>	Exámenes parciales	<input checked="" type="checkbox"/>
Exposición audiovisual	<input type="checkbox"/>	Examen final escrito	<input checked="" type="checkbox"/>
Ejercicios dentro de clase	<input checked="" type="checkbox"/>	Trabajos y tareas fuera del aula	<input checked="" type="checkbox"/>
Ejercicios fuera del aula	<input checked="" type="checkbox"/>	Exposición de seminarios por los alumnos	<input type="checkbox"/>
Seminarios	<input type="checkbox"/>	Participación en clase	<input type="checkbox"/>
Lecturas obligatorias	<input type="checkbox"/>	Asistencia	<input type="checkbox"/>
Trabajo de investigación	<input type="checkbox"/>	Seminario	<input type="checkbox"/>
Prácticas de taller o laboratorio	<input type="checkbox"/>	Otras:	<input type="checkbox"/>
Prácticas de campo	<input type="checkbox"/>		
Otras: _____	<input type="checkbox"/>		