9-10

GUÍA DE ESTUDIO DE LDI

METODOS TEORICOS QUIM. FISICA

CÓDIGO 01095335

UNED

9-10

METODOS TEORICOS QUIM. FISICA

CÓDIGO 01095335

ÍNDICE

OBJETIVOS
CONTENIDOS
EQUIPO DOCENTE
BIBLIOGRAFÍA BÁSICA
BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA
SISTEMA DE EVALUACIÓN
HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE
OTROS MATERIALES
IGUALDAD DE GÉNERO

OBJETIVOS

Con esta asignatura se pretende completar la formación matemática del estudiante de Química en los siguientes dominios:
–Análisis Numérico.
– Estadística Teórica.
– Teoría de Grupos.
– Simetría Molecular.

Mostrándole una serie de técnicas útiles para la comprensión y estudio de problemas de interés químico.

CONTENIDOS

La extensión de la asignatura es de 18 temas agrupados en dos volúmenes. El primero se dedica al Análisis Numérico y la Estadística Teórica, en tanto que el segundo lo hace a la Teoría de Grupos y la Simetría Molecular. En general, para toda la asignatura, no será necesario memorizar fórmulas ni desarrollos matemáticos, pero sí saber cuándo y dónde deben aplicarse.
Temario
VOLUMEN 1 (ANÁLISIS NUMÉRICO Y ESTADÍSTICA)
TEMA 1. La aproximación polinómica de colocación. TEMA 2. Aplicaciones de la aproximación polinómica. TEMA 3. Resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias. TEMA 4. Aproximación por mínimos cuadrados y desarrollos en serie de funciones ortogonales. TEMA 5. Resolución numérica de ecuaciones no lineales y diagonalización de matrices. TEMA 6. Variables aleatorias y distribuciones de probabilidad. TEMA 7. Distribuciones de magnitudes aleatorias en una dimensión. TEMA 8. Distribuciones de magnitudes aleatorias en dos dimensiones y correlación. TEMA 9. Procesos estocásticos y cadenas de Markov discretas.
VOLUMEN 2 (TEORÍA DE GRUPOS Y SIMETRÍA)
TEMA 10. Simetría y teoría de grupos. TEMA 11. Grupos de simetría. TEMA 12. Representaciones de grupos. TEMA 13. Propiedades de las representaciones irreducibles. TEMA 14. Representaciones y mecánica cuántica. TEMA 15. Simetría, teorías del enlace químico y espectroscopía electrónica. TEMA 16. Reglas de simetría en las reacciones químicas. TEMA 17. Vibraciones moleculares. TEMA 18. Simetría y espectroscopía vibracional.
Es muy importante que el alumno planifique el curso dedicando más horas de estudio a los Temas 4, 9, 12 y 13 que al resto del Temario, ya que estos temas suelen plantear mayores dificultades.

EQUIPO DOCENTE

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13):9788436225440
Título:MÉTODOS TEÓRICOS DE LA QUÍMICA FÍSICA (1ª)
Autor/es:
Editorial:U.N.E.D.

ISBN(13):9788436226096
Título:MÉTODOS TEÓRICOS DE LA QUÍMICA FÍSICA (1ª)
Autor/es:
Editorial:U.N.E.D.

SESÉ, L. M.: *Métodos Teóricos de la Química Física* (Vol. 1). UNED, 1.ª Re-impresión (revisada), 1994.
HERNANZ, A.: *Métodos Teóricos de la Química Física* (Vol. 2). UNED, 1.ª Re-impresión (revisada), 2006.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Para el Volumen 1:
RALSTON, A.: Introducción al Análisis Numérico. Limusa-Wiley. México,1970.
SCHEID, F.: Análisis Numérico. McGraw-Hill, México, 1972.
CRAMER, H.: Elementos de la teoría de probabilidades. Aguilar. Madrid,1977.
Para el Volumen 2:
COTTON, F. A.: La teoría de grupos aplicada a la química. Ed. Limusa. México, 1977.
COTTON, F. A.: Chemical Applications of Group Theory. 3.a ed., Wiley.Chichester, UK, 1990.
CARTER, R. L.: Molecular Symmetry and Group Theory. Wiley. Nueva York, 1998.
BUNKER, P. R. y JENSEN, P.: Molecular Symmetry and Spectroscopy. 2.a ed.NRC. Research Press. Ottawa, 1998.
HARRIS, D.C. y BERTOLUCCI, M.D.: Symmetry and Spectroscopy: An introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy. Dover, Mineola, N. Y., 1990.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

En esta asignatura no se contempla la realización de Pruebas de Evaluación a Distancia. En su lugar, a lo largo del curso el equipo docente propondrá al alumno la realización de dos trabajos obligatorios (uno por volumen) sobre aspectos del temario de su interés. Podrá optar entre las siguientes alternativas:

*a)*Realización de una serie de ejercicios representativos de la Asignatura, bien vinculados a un Tema, bien a toda ella.

*b)*Comentario de artículos de investigación.

*c)*Realización de cálculos a nivel intermedio, siendo necesario tener facilidades de tipo ordenador personal o similar y conocimientos de programación (BASIC o FORTRAN).

a), *b)* y *c)* podrán ser realizadas por el alumno en su propio domicilio.

*d)*Posibilidad de desplazarse a la Sede Central para realizar tanto los cálculos c) como observaciones experimentales con la infraestructura de la Facultad de Ciencias (medios de cálculo y técnicas espectroscópicas).

7.1. TRABAJOS

La realización de los trabajos obligatorios citados puede llegar a constituir en conjunto entre un 50 y un 70 por 100 de la calificación final. Se facilitará toda la documentación que se estime oportuna y cada trabajo estará bajo la supervisión directa de uno de los profesores. Concluidos éstos, se remitirán al supervisor para su evaluación.

7.2. PRUEBAS PRESENCIALES

Este tipo de prueba es de carácter obligatorio. En cada curso habrá una PP ordinaria del 1.er cuatrimestre y otra extraordinaria en septiembre. Su duración será de una única sesión de dos (2) horas. Constarán de varias preguntas cortas de respuesta concisa y razonada. Como material auxiliar sólo se permitirá el uso de calculadora y de la Addenda "Relaciones y Tablas Matemáticas" citada en el apartado OTROS MATERIALES.

La evaluación final de la asignatura se calificará como la media ponderada de los trabajos y Pruebas Presenciales.

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

Para todas las cuestiones relativas al **Volumen 1** dirigirse a:

D. Luis M. Sesé

Lunes, de 16.00 a 20.00 horas. Tel.: 91 398 73 87. Despacho: 321

Para todas las cuestiones relativas al **Volumen 2** dirigirse a:

D. Antonio Hernanz

Martes, de 16.00 a 20.00 horas. Tel.: 91 398 73 77. Despacho: 309. Dirección: Facultad de Ciencias, Paseo Senda del Rey, n.° 9, 28040 Madrid

Pueden dejarse cartas, notas o avisos en el buzón de los profesores en la Planta Baja del citado edificio.

NOTA IMPORTANTE

Una vez matriculado, el alumno deberá enviar cuanto antes una de las fichas que encontrará en el apartado dedicado a INFORMACIÓN GENERAL del Departamento de Ciencias y Técnicas Fisicoquímicas. Hará constar, en su caso, el tipo de trabajos que desea llevar a

cabo. Recibida esta información, se le remitirá una circular con observaciones más concretas relativas al desarrollo del curso.

OTROS MATERIALES

HERNANZ, A. y SESÉ, L. M.: *Métodos Teóricos de la Química Física (Relaciones y Tablas Matemáticas)*. Addenda. UNED, 1990.
HERNANZ, A. (autor) y GUZMÁN, G. (realizador): *Elementos y operaciones de simetría molecular*. Vídeo (CEMAV). UNED, 1989.

IGUALDAD DE GÉNERO

En coherencia con el valor asumido de la igualdad de género, todas las denominaciones que en esta Guía hacen referencia a órganos de gobierno unipersonales, de representación, o miembros de la comunidad universitaria y se efectúan en género masculino, cuando no se hayan sustituido por términos genéricos, se entenderán hechas indistintamente en género femenino o masculino, según el sexo del titular que los desempeñe.