

15-16

GUÍA DE ESTUDIO DE LDI



METODOS TEORICOS QUIM. FISICA

CÓDIGO 01095335

UNED

15-16

MÉTODOS TEÓRICOS QUIM. FÍSICA

CÓDIGO 01095335

ÍNDICE

OBJETIVOS

CONTENIDOS

EQUIPO DOCENTE

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

SISTEMA DE EVALUACIÓN

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

AVISO IMPORTANTE

En el Consejo de Gobierno del 30 de junio de 2015 se aprobó, por unanimidad, que la convocatoria de exámenes extraordinarios para planes en extinción de Licenciaturas, Diplomaturas e Ingenierías, prevista para el curso 2015-2016, se desarrolle según el modelo ordinario de la UNED, esto es, en tres convocatorias:

- febrero de 2016 (1ª y 2ª semana), para asignaturas del primer cuatrimestre y primera parte de anuales.
- junio de 2016 (1ª y 2ª semana) para asignaturas del segundo cuatrimestre y segunda parte de anuales.
- septiembre de 2016 para todas las asignaturas.

Si en alguna guía aparecen referencias sobre una sola convocatoria en febrero, esta información queda invalidada ya que tiene prevalencia la decisión del Consejo de Gobierno.

En el curso 2015-2016 esta asignatura no tendrá activado el curso virtual.

OBJETIVOS

ESTA ASIGNATURA NO TENDRÁ TUTORÍA NI SEGUIMIENTO DOCENTE.

SÓLO CONSERVA UNA CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA DE EXAMEN EN EL TURNO DE FEBRERO DE 2016.

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:Sesé Sánchez, Luis M. ;

Editorial:U.N.E.D.

ISBN(13):9788436226096

Título:MÉTODOS TEÓRICOS DE LA QUÍMICA FÍSICA (1ª)

Autor/es:Hernanz Gismero, Antonio ;

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

PRUEBA PRESENCIAL febrero 2016

Su duración será de una única sesión de dos (2) horas. Constará de varias preguntas cortas de respuesta concisa y razonada. Como material auxiliar sólo se permitirá el uso de calculadora científico-técnica (no programable) y de la Addenda "Relaciones y Tablas Matemáticas" citada en el apartado OTROS MATERIALES.

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

Lunes, de 16.00 a 20.00 horas. Tel.: 91 398 73 77. Despacho: 309. Dirección: Facultad de Ciencias, Paseo Senda del Rey, n.º 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.