Guía docente de la asignatura

Teoría de Grupos y Simetría Molecular (M43/56/4/9)

Fecha de aprobación por la Comisión Académica: **04/07/2025**

Máster	Máster Universitario en Ciencias y Tecnologías Químicas, Khemia
MÓDULO	Avances en Química
RAMA	Ciencias
CENTRO RESPONSABLE DEL TÍTULO	Escuela Internacional de Posgrado

Semestre	Primero	**Créditos**	3	**Tipo**	Optativa	**Tipo de enseñanza**	Presencial

PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES

No hay recomendaciones especiales para cursar esta asignatura, aunque ayuda el hecho de poseer una cierta visión espacial.

BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (Según memoria de verificación del Máster)

Elementos y operaciones de simetría. Grupos puntuales de simetría. Aplicación de la simetría molecular a la construcción de diagramas de orbitales moleculares y a la espectroscopía IR y UV. Reglas de selección. Método de Hückel para la obtención de niveles de energía pi en sistemas con dobles enlaces. Términos espectroscópicos del ión libre, acoplamiento espín–órbita y términos en un campo de ligandos para metales 3d. Términos y espectroscopía UV en lantánidos.

COMPETENCIAS

COMPETENCIAS BÁSICAS

- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): 701B35F9586DC2DC83A6A1E38AF42B19
06/05/2026 - 11:02
Pág. 1 de 7

- 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.
- 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.

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE01 - Poseer y comprender conocimientos químicos avanzados, tanto a nivel teórico como de su aplicación práctica.
- CE02 - Aplicar conocimientos teórico-prácticos a la resolución de problemas científico-técnicos relacionados con las ciencias y tecnologías químicas.
- CE03 - Comprender, analizar y solucionar problemas avanzados relacionados con la Química mediante el uso de las herramientas y metodologías aprendidas.

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT06 - Trabajo en equipo

COMPETENCIAS

COMPETENCIAS BÁSICAS

- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en 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.
- 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.

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): 701B35F9586DC2DC83A6A1E38AF42B19
06/05/2026 - 11:02
Pág. 2 de 7

- CE01 - Poseer y comprender conocimientos químicos avanzados, tanto a nivel teórico como de su aplicación práctica.
- CE02 - Aplicar conocimientos teórico-prácticos a la resolución de problemas científico-técnicos relacionados con las ciencias y tecnologías químicas.
- CE03 - Comprender, analizar y solucionar problemas avanzados relacionados con la Química mediante el uso de las herramientas y metodologías aprendidas.

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT06 - Trabajo en equipo

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

Al cursar esta materia el alumno:

(1) Aprenderá que las propiedades moleculares están íntimamente ligadas a su simetría.

(2) Conocerá la diferencia entre elementos y operaciones de simetría, así como su derivación en Grupos Puntuales de Simetría.

(3) Aprenderá la importancia de las posiciones atómicas equivalentes y su uso en RMN (1H y 13C).

(4) Aprenderá a utilizar las funciones de onda como bases de representaciones irreducibles.

(5) Aprenderá a construir diagramas de interacción entre representaciones y su correspondiente conversión en diagramas de orbitales moleculares.

(6) Conocerá y aplicará el operador proyección, así como el producto directo entre representaciones.

(7) Aplicará la teoría de grupos al análisis vibracional de moléculas sencillas.

(8) Aprenderá la aproximación de Hückel al enlace pi en sistemas pi abiertos y cerrados.

(9) Aprenderá cómo determinar los términos del ión libre, el acoplamiento espín-órbita, y la acción del campo cristalino.

(10) Aprenderá a analizar espectros sencillos UV-visible con ayuda de la teoría de grupos y las reglas de selección en el caso de metales 3d y lantánidos.

PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

TEÓRICO

· **Tema 1. Simetría molecular y grupos puntuales de simetría.** Introducción. Elementos y operaciones de simetría. Grupos puntuales de simetría. Forma matricial de las transformaciones geométricas.

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): 701B35F9586DC2DC83A6A1E38AF42B19
06/05/2026 - 11:02
Pág. 3 de 7

· **Tema 2. Simetría y RMN.** Simetría molecular. Posiciones equivalentes.

· **Tema 3. Representaciones de los grupos.** Representaciones reducibles e irreducibles. Tabla de caracteres. Reducción de representaciones. Grupos y subgrupos: reducción de la simetría.

· **Tema 4. Simetría y enlace I. Espectroscopía infrarroja.** Momento dipolar y absorción de radiación. Representaciones y grados de libertad vibracional. Simetría de los modos normales de vibración. Bandas activas en IR y RAMAN.

· **Tema 5. Simetría y enlace II. Orbitales moleculares.** Representaciones y orbitales atómicos. Construcción cualitativa de orbitales moleculares para moléculas sencillas. Operador proyección.

· **Tema 6. Método de Hückel para sistemas pi.** Determinación semicuantitativa de diagramas de orbitales moleculares de sistemas pi abiertos y cerrados. Energía de deslocalización, cargas y orden de enlace pi.

· **Tema 7. Simetría y enlace III. Estructura electrónica.** Términos del ión libre y acoplamiento espín-órbita. Tipos de transiciones electrónicas. Reglas de selección. Transiciones d-d. Términos en un campo de ligandos en metales 3d. Términos y espectroscopía UV en lantánidos.

PRÁCTICO

· **Seminario práctico.** Cálculo computacional de algunas de las propiedades moleculares estudiadas en la parte teórica.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

- Cotton, F. Albert.; La teoría de grupos aplicada a la química. Editorial LIMUSA: Méjico, 1991.

- Davidson, G.; Group theory for chemists; Ed. MacMillan Physical Science Series: Palgrave Macmillan, 1991.

- Bishop, David M.; Group theory and chemistry; Ed. Dover Publications: USA, 1993.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- Purcell, K.F.; Kotz, J.C.; Química Inorgánica. Ed. Reverté: Barcelona, 1999.

- Ribas, J.; Química de la coordinación; Ed. Omega: Ed. Universitat de Barcelona, Barcelona, 2000.

ENLACES RECOMENDADOS

- http://vallance.chem.ox.ac.uk/pdfs/SymmetryLectureNotes.pdf
- https://ethz.ch/content/dam/ethz/special-interest/chab/physical-chemistry/ultrafast-spectroscopy-dam/documents/lectures/spectroscopyFS20/Script/PCV_Ch4.pdf

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:02
Código seguro de verificación (CSV): 701B35F9586DC2DC83A6A1E38AF42B19 Pág. 4 de 7

- https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Group_Theory/Group_Theory%3A_Theory
- https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Inorganic_Chemistry/Map%3A_Inorganic_Chemistry_(Housecroft)/04%3A_Experimental_techniques/4.13%3A_Computational_Methods/4.13C%3A_Huckel_MO_Theory
- http://www.qfa.uam.es/qcomp/libros/l1.pdf
- http://www.molmag.manchester.ac.uk/software/CHEM20212_2020_4.pdf
- https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Spectroscopy/Electronic_Spectroscopy/Spin-orbit_Coupling/The_Russell_Saunders_Coupling_Scheme
- http://bh.knu.ac.kr/~leehi/index.files/Coordination_Chemistry_Electronic_Spec.pdf

METODOLOGÍA DOCENTE

- MD01 Clases magistrales/expositivas. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes métodos: sesión expositiva, aprendizaje basado en problemas, ejemplificación y estudio de casos.
- MD02 Clases de resolución de problemas. El equipo docente podrá utilizar algunos de los siguientes métodos para su desarrollo: Aprendizaje basado en problemas; ejemplificación y estudio de casos.
- MD03 Clases prácticas. El equipo docente podrá recurrir a métodos como estudio de casos, análisis diagnósticos, prácticas de laboratorio, aula de informática, visitas, búsqueda de datos, etc.
- MD04 Talleres, seminarios, debates, exposición (y/o defensa) de trabajos individuales o en grupo. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes métodos: aprendizaje basado en problemas, ejemplificación y estudio de casos
- MD05 Tutorías: Programadas y de seguimiento (para trabajos de fin de Máster y Prácticas de Empresa), pudiéndose utilizar en las modalidades personalizada o en grupo, sincrónica (presenciales) o asincrónica (virtuales). La modalidad seleccionada por el equipo docente quedará recogida en la Guía Docente de cada materia
- MD07 Estudio y trabajo autónomo, individual y/o en grupo

EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)

EVALUACIÓN ORDINARIA

El procedimiento será el de evaluación continua:

(A) Instrumentos de evaluación:

- Pruebas escritas. Examen final de la asignatura. Su formato (preguntas largas, cortas, pruebas respuesta múltiple, etc.) será seleccionado por el equipo docente encargado de

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:02
Código seguro de verificación (CSV): 701B35F9586DC2DC83A6A1E38AF42B19 Pág. 5 de 7

impartir la materia. Su contenido y duración serán establecidos de acuerdo con la Normativa de Evaluación y Calificación aprobada por la UGR en Consejo de Gobierno de 20 de Mayo de 2013.

- Trabajo sobre un tema específico. Se establecerá, para cada alumno, un trabajo de clase para realizar durante el trascurso de la asignatura. Dicho trabajo tendrá una extensión mínima de 20 páginas.

- Resolución de ejercicios. Durante la asignatura se mandará, diariamente, un pequeño número de tareas sencillas sobre lo visto ese día, que el alumno deberá ir resolviendo. Cada etapa o hito alcanzado será evaluado y el alumno recibirá retroalimentación sobre el aspecto a tratar.

- Evaluación de asistencia y participación activa. Se basa en la valoración de actitudes e iniciativas de participación activa e interactiva en el desarrollo de la clase, en las tutorías, o en el grado de compromiso en el desarrollo de los trabajos planeados, en las prácticas de laboratorio o cualquier otra tarea asignada, pudiéndose evaluar, si procede, la capacidad de trabajo en equipo.

(B) Criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final:

Criterio de evaluación	**% sobre la calificación final**
Conocimientos teóricos adquiridos (examen)	60
Exposición de trabajos, informes, conclusiones	20
Resolución de ejercicios	15
Valoración de actitudes e iniciativas de participación activa e interactiva en el desarrollo de la clase, en las tutorías, o en el grado de compromiso en el desarrollo de los trabajos planeados o en cualquier otra tarea asignada, así como la asistencia.	5

EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

El artículo 19 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que los estudiantes que no hayan superado la asignatura en la convocatoria ordinaria dispondrán de una convocatoria extraordinaria. A ella podrán concurrir todos los estudiantes, con independencia de haber seguido o no un proceso de evaluación continua. De esta forma, el estudiante que no haya realizado la evaluación continua tendrá la posibilidad de obtener el 100% de la calificación mediante la realización de una prueba y/o trabajo designado por el profesor. Dicho trabajo tendrá una extensión mínima de 20 páginas.

- Prueba escrita: 75% de la calificación

- Trabajo: 25% de la calificación

EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

El artículo 8 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que podrán acogerse a la evaluación única final, el estudiante que no pueda cumplir con el método de evaluación continua por causas justificadas.

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:02
Código seguro de verificación (CSV): 701B35F9586DC2DC83A6A1E38AF42B19 Pág. 6 de 7

Para acogerse a la evaluación única final, el estudiante, en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura o en las dos semanas siguientes a su matriculación si ésta se ha producido con posterioridad al inicio de las clases o por causa sobrevenidas. Lo solicitará, a través del procedimiento electrónico, a la Coordinación del Máster, quien dará traslado al profesorado correspondiente, alegando y acreditando las razones que le asisten para no poder seguir el sistema de evaluación continua.

Se realizará un examen escrito sobre los conocimientos que deben haberse adquirido en el desarrollo de la asignatura. Dicho examen tendrá un valor del 100% de la calificación final e incluirá preguntas del temario de la asignatura.

INFORMACIÓN ADICIONAL

Cualquier problema que pudiera presentar el alumno para el correcto desarrollo del curso (asistencia, realización del examen, etc) deberá ser notificado al profesor a la mayor brevedad para tomar la mejor decisión de cara a su posible solución.

Información de interés para estudiantado con discapacidad y/o Necesidades Específicas de Apoyo Educativo (NEAE): Gestión de servicios y apoyos (https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad).

SOFTWARE LIBRE

Cálculos computacionales con el programa ORCA v.6

Edición y visualización molecular con Chemcraft

Visualización de estructuras de Rayos-X con Mercury

Evaluación de propiedades moleculares con Multiwfn.

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): **701B35F9586DC2DC83A6A1E38AF42B19**
06/05/2026 - 11:02
Pág. 7 de 7