

Métodos matemáticos para fisicoquímica (214651)

Andrés Cedillo (AT-250)

Objetivos

- Profundizar los conocimientos en las matemáticas necesarias para el estudio de la estructura electrónica
- Adquirir destreza en el planteamiento y la solución de algunos problemas relacionados con la estructura electrónica

Temario

1. Transformadas integrales

Transformada de Fourier
Transformada de Laplace
Operadores integrales

2. Ecuaciones diferenciales ordinarias

Ecuaciones lineales homogéneas
Ecuaciones lineales no homogéneas
Función de Green
Algunas propiedades generales

3. Soluciones en series

Solución alrededor de un punto ordinario
Solución alrededor de un punto singular regular
Segunda solución
Soluciones polinomiales
Ecuaciones de Legendre y de Bessel

4. Métodos de valores propios

Operadores adjuntos y hermitianos
Ecuaciones de Sturm-Liouville
Superposición de funciones propias
Función de Green

5. Ecuaciones integrales

Tipos de ecuaciones integrales
Algunos métodos de solución
Series de Neumann
Método de Fredholm
Problemas de Schmidt-Hilbert

6. Cálculo variacional

Ecuación de Euler-Lagrange
Variación condicionada
Principios variacionales
Problemas de valores propios

7. Cálculo funcional

Tipos de funcionales
Problemas variacionales
Derivadas funcionales y series de Taylor
Aplicaciones en estructura electrónica

8. Ecuaciones diferenciales parciales (opcional)

Método de separación de variables
Superposición de soluciones separadas
Separación en coordenadas polares
Métodos con transformadas integrales

Bibliografía

Texto:

KF Riley, MP Hobson and SJ Bence
Mathematical Methods for Physics and Engineering
Cambridge, 1997

Referencias adicionales:

Arfken & Weber, *Mathematical Methods for physicists*, Academic, 4th ed, 1995. (1-6,8)
Boas, *Mathematical Methods in the Physical Sciences*, Wiley, 2nd ed, 1983. (1-4,6,8)
Byron & Fuller, *Mathematics of Classical and Quantum Physics*, Dover, 1992. (1,4-6,8)
Kreyszig, *Advanced Engineering Mathematics*, Wiley, 1983. (1-4,8)
Sokolnikoff & Redheffer, *Mathematics of Physics and Modern Engineering*, McGraw, 1958. (1-4,8)
Greenberg, *Advanced Engineering Mathematics*, Prentice, 2nd ed, 1998. (1-4,8)
Dennery & Krzywicki, *Mathematics of Physicists*, Dover, 1996. (1-4,8)
Hildebrand, *Methods of Applied Mathematics*, Dover, 1992. (5,6)
Wallace, *Mathematical Analysis of Physical Problems*, Dover, 1984. (1,4-5,8)

Evaluación

Los problemas se entregarán en la sesión siguiente y no se contabilizarán problemas atrasados. La calificación será el promedio de problemas correctos con respecto al total (aprox. 100).

Escala de calificaciones

MB: 87-100 B: 74-86 S: 60-73 NA: 0-59

Trimestre 00-I, grupo CQ13

Horario: Ma, Ju 8:45-11:00
Asesoría: Lu, Mi, Vi 9:00-9:30

Requisitos

Cálculo diferencial e integral

Números complejos y funciones trascendentes

Series, suma de sucesiones, convergencia y series de Taylor

Cálculo de varias variables: derivadas parciales e integrales múltiples

Álgebra de vectores y matrices

Espacios vectoriales

Análisis vectorial: operadores diferenciales vectoriales y teoremas integrales

Series de Fourier

Ecuaciones diferenciales de primer orden

Ver por ejemplo:

Edwards y Penney, *Cálculo con geometría analítica*

Edwards y Penney, *Ecuaciones diferenciales*

Courant & John, *An introduction to calculus & analysis*, vols I and II.

Boas, Kreyszig, Sokolnikoff, Greenberg, Wallace