

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

Código	40432
Nombre	Introd al Máster en nanociencia y nanotecnol molecular: conceptos básicos de nivelación
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	6.0
Curso académico	2013 - 2014

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2049 - M.U. en Nanociencia y Nanotecnología Molecular 09-V.1	FACULTAT DE QUÍMICA	1	Primer cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Carácter
2049 - M.U. en Nanociencia y Nanotecnología Molecular 09-V.1	1 - Introducción al máster en nanociencia y nanotecnología molecular: conceptos básicos de nivelación	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
CORONADO MIRALLES, EUGENIO	320 - QUÍMICA INORGÁNICA
SANCHEZ MARIN, JOSE	315 - QUÍMICA FÍSICA
SEGURA GARCIA DEL RIO, ALFREDO	175 - FISICA APLICADA Y ELECTROMAGNETISMO

RESUMEN

El objetivo de esta asignatura es asegurar una homogeneidad en conocimientos básicos de Química y de Física necesarios para la nanociencia independientemente de la formación previa que tengan los estudiantes matriculados que normalmente procederán de grados científicos o tecnológicos tales como Biología, Bioquímica o Ingeniería Química, aparte de Química o Física, en los que los contenidos y objetivos de este curso se pueden haber obtenido en niveles muy diferentes.

CONOCIMIENTOS PREVIOS



Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

Otros tipos de requisitos

COMPETENCIAS

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Se plantean para los alumnos que sigan el curso los siguientes objetivos:

1. Obtener o demostrar la capacidad de manejar el **lenguaje básico** de la estructura y enlace químicos de las moléculas, tanto inorgánicas como orgánicas, incluyendo las interacciones moleculares no enlazadas.
2. Obtener o demostrar la capacidad de manejar el **lenguaje básico** de la Química Teórica y Computacional en relación con el objetivo anterior.
3. Obtener o demostrar conocimiento **básico** del cálculo de propiedades termodinámicas a partir de conceptos estadísticos.
4. Obtener o demostrar la capacidad de manejar el **lenguaje básico** de la estructura y enlace en estado sólido.
5. Obtener o demostrar la capacidad de manejar el **lenguaje básico** de la estructura electrónica en estado sólido.
6. Obtener o demostrar la capacidad de manejar el **lenguaje básico** de la óptica física en relación con interacción entre la radiación electromagnética y el sólido.
7. Obtener o demostrar la capacidad de manejar el **lenguaje básico** de las propiedades eléctricas y magnéticas.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Introducción al Máster en Nanociencia y Nanotecnología Molecular: Conceptos básicos de nivelación



1 Conceptos básicos de estructuras moleculares y enlace: Valencia, estructuras de Lewis, resonancia, estado de oxidación, complejos de coordinación (campo cristalino). Conceptos de periodicidad química. Nomenclatura básica en química molecular: sistemas alifáticos, sistemas aromáticos, sistemas conjugados, aromaticidad, radicales.

2 Conceptos de Química cuántica: Ecuación de Schroedinger. Cuantización de la energía. Electrón en caja; Efecto túnel. Estados electrónicos. HOMO/LUMO. Interacciones moleculares.

3 Conceptos de Termoestadística: Microestados y configuraciones, Estadísticas de Maxwell-Boltzmann, Fermi-Dirac y Bose-Einstein, Función de partición.

4 Conceptos de Óptica Física: Ecuaciones de Maxwell, ondas electromagnéticas, cuantización del campo electromagnético. Fotones. Índice de refracción, coeficiente de absorción, fotoluminiscencia, electroluminiscencia, óptica no lineal.

5 Estructura y enlace en sólidos: Tipos de sólidos, periodicidad, enlace, estructura y propiedades.

6 Estructura electrónica de sólidos: Estructura de bandas (Ejemplo: 1D). Conceptos: Dispersión de bandas, densidad de estados, nivel de Fermi, función de trabajo. Espacio recíproco, zonas de Brillouin y superficies de Fermi. Estructura electrónica y propiedades.

7 Propiedades magnéticas: paramagnetismo, ferromagnetismo, antiferromagnetismo, ferrimagnetismo.

VOLUMEN DE TRABAJO

	Horas
ACTIVIDADES PRESENCIALES	
Clases de teoría	40.0
Seminarios	12.0
Tutorías regladas	8.0
Total Actividades Presenciales	60.0
TOTAL	60.0

METODOLOGÍA DOCENTE

Clases teóricas lección magistral participativa

Discusión de artículos (lecturas)

Resolución de casos prácticos

Problemas

Seminarios

Debate o discusión dirigida

– Grupo de trabajo

EVALUACIÓN

- Exámen práctico.

- Examen final.

- Evaluación continua.



REFERENCIAS

Básicas

- Otilia Mó Y y M. Yañez.
Enlace químico y estructura molecular (2ªed.).
Cálamo Producciones Editoriales. Barcelona (2002).

Atkins,P.W. y Friedman, R.S. Oxford U.P. (2003)
Molecular Quantum Mechanics.
Oxford U.P. (2003).

F Jensen.
Introduction to COMPUTATIONAL CHEMISTRY.
Wiley. New York (1999).

Christopher J. Cramer.
Essentials of Computational Chemistry.
John Wiley and Sons. New York. (2004).

T. Engel y P. Reid.
Química Física.
Pearson Educación S.A., (2006)

P.W. Atkins.
Química Física.
Ed. Omega, (1999)

J. Bertrán y J. Nuñez (Coordinadors).
Química Física.
Ed. Ariel. (2002) (En dos volums)

C. Kittel
Introduction to solid state physics
Ed. John Wiley, 1976

R. Hoffmann
Solids and Surfaces
Ed. Wiley-VCH, 1988

A. Hernando y J. Rojo
Física de los materiales magnéticos
Ed. Síntesis, 2001

Complementarias



- H. Petrucci y W.S. Harwood.
Química general. Principios y aplicaciones modernas (8ªed.).
Prentice Hall. Madrid (2003).

- B.G. Segal.
Chemistry. Experiment and Theory (2ªed.).
Wiley. Nueva York (1989)

- W.L. Masterton, C.N. Hurley.
Química. Principios y reacciones (4ªed.).
Thomson. Madrid (2003).

- K.W. Whiten, K.D. Gailey y R.E. Davis.
Química general (3ªed.).
McGraw-Hill. México (1992).

- J.B. Umland y J.M. Bellama
Química General (3ª ed.).
Thomson. México (2000).

- J.C. Bailar, T. Moeller, J. Kleinberg, C.O. Guss, M.E. Castellion y C. Metz.
Química.
Vicens-Vives. Barcelona (1983).