

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

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

**Titulación(es)**

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

**Materias**

<b>Titulación</b>	<b>Materia</b>	<b>Carácter</b>
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**

<b>Nombre</b>	<b>Departamento</b>
CORONADO MIRALLES, EUGENIO	320 - QUÍMICA INORGÁNICA
SANCHEZ MARIN, JOSE	315 - QUÍMICA FÍSICA
SEGURA GARCIA DEL RIO, ALFREDO	175 - FÍSICA 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
<b>ACTIVIDADES PRESENCIALES</b>	
Clases de teoría	40.0
Seminarios	12.0
Tutorías regladas	8.0
<b>Total Actividades Presenciales</b>	<b>60.0</b>
<b>TOTAL</b>	<b>60.0</b>

## 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).