

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

<b>Código</b>	44417
<b>Nombre</b>	Introducción al máster en nanociencia y nanotecnología molecular: Conceptos básicos
<b>Ciclo</b>	Máster
<b>Créditos ECTS</b>	6.0
<b>Curso académico</b>	2021 - 2022

**Titulación(es)**

<b>Titulación</b>	<b>Centro</b>	<b>Curso</b>	<b>Periodo</b>
2208 - M.U. en Nanociencia y Nanotecnología Molecular	Facultad de Química	1	Primer cuatrimestre

**Materias**

<b>Titulación</b>	<b>Materia</b>	<b>Caracter</b>
2208 - M.U. en Nanociencia y Nanotecnología Molecular	1 - Introducción al máster en nanociencia y nanotecnología molecular: Conceptos básicos.	Obligatoria

**Coordinación**

<b>Nombre</b>	<b>Departamento</b>
CORONADO MIRALLES, EUGENIO	320 - Química Inorgánica

**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.

**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

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

## COMPETENCIAS

### 2208 - M.U. en Nanociencia y Nanotecnología Molecular

- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- Que los estudiantes hayan adquirido los conocimientos y habilidades necesarias para seguir futuros estudios de doctorado en Nanociencia y Nanotecnología
- Que los estudiantes de un área de conocimiento (p.e. física) sean capaces de comunicarse e interactuar científicamente con colegas de otras áreas de conocimiento (p.e. química en la resolución de problemas planteados por la Nanociencia y la Nanotecnología Molecular.
- Conocer los fundamentos de física del estado sólido y de química supramolecular necesarios en nanociencia molecular
- Conocer las aproximaciones metodológicas utilizadas en Nanociencia.

## RESULTADOS DE APRENDIZAJE

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. Estos 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.

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. Conceptos básicos en química.

1. Principios de reactividad: Equilibrio químico (4 horas)
  - a) Conceptos generales sobre disoluciones acuosas
  - b) Introducción a las reacciones de ácido-base, oxidación-reducción y precipitación.
2. Química de coordinación (9 horas)
  - a) Introducción
  - b) Estructura de los compuestos de coordinación
  - c) Teoría del enlace.
  - d) Cinética y mecanismos de reacción de compuestos de coordinación.
3. Química orgánica: (9 HORAS)
  - a) Constitución de los compuestos orgánicos: esqueleto hidrocarbonado y grupos funcionales. Reglas básicas de nomenclatura. Conceptos estereoquímicos básicos: Quiralidad y actividad óptica. Conformación y configuración. Enantiómeros y diastereoisómeros.
  - b) Deslocalización electrónica Resonancia. Aromaticidad. Propiedades ácido-base de los compuestos orgánicos: Relación estructura acidez
  - c) Estructura tridimensional: estereoquímica y quiralidad.
4. Determinación estructural (4 horas).
  - a) Conceptos de Simetría. Grupos de simetría.
  - b) Vibraciones en Moléculas. Espectroscopia de infrarrojo y Raman. Espectros de IR de compuestos



orgánicos e inorgánicos: Zonas de vibración características. Factores que influyen sobre las frecuencias de grupo. Principales grupos funcionales y frecuencias características. Enlace de hidrógeno. Frecuencias características de compuestos de coordinación y organometálicos. Modo de coordinación de ligandos. Estereoquímica en torno al átomo central.

c) Otras Espectroscopias y Espectrometrías. Resonancia Magnética Nuclear.

Aspectos generales. Descripción básica del fenómeno de la RMN. Desplazamiento Químico. Espectrometría de Masas. Fundamentos. Técnicas experimentales en espectrometría de masas.

## 2. Conceptos básicos en física

1. Estructura Cristalina y Espacio Recíproco (6 horas)
  - 1.1. Interacciones entre los átomos de un sólido
  - 1.2. Estructura cristalina: celda unidad y redes de Bravais
  - 1.3. Técnicas de difracción y espacio recíproco
  - 1.4. Seminario
2. Vibraciones en Moléculas y Cristales (4 horas)
  - 2.1. Pequeñas oscilaciones alrededor del equilibrio
  - 2.2. Modos normales de vibración en moléculas
  - 2.3. Sistemas infinitos. Ecuación de ondas. Fonones en cristales.
  - 2.4. Oscilaciones amortiguadas, forzadas y resonancia.
  - 2.5. Seminario (1 hora)
3. Estructura Electrónica de Sólidos (8 horas)
  - 3.1. Introducción a la Física Cuántica. Función de Ondas. Operadores y Estados. Amplitudes de probabilidad. Ecuación de Schrödinger.
  - 3.2. Confinamiento cuántico y estados ligados.
  - 3.3. Bandas en sólidos. Masa efectiva. Densidad de Estados.
  - 3.4. Seminario.
4. Electromagnetismo en la materia (8 horas)
  - 4.1. Fuerzas eléctrica y magnética sobre cargas en movimiento. Fuerza de Lorentz.
  - 4.2. Electrostática: Ley de Gauss.
  - 4.3. Magnetostática: Ley de Ampère.
  - 4.4. Inducción electromagnética: Ley de Faraday.
  - 4.5. Ecuaciones de Maxwell y ondas electromagnéticas.
  - 4.6. Constante dieléctrica y polarización: Conductores y dieléctricos.
  - 4.7. Susceptibilidad magnética y propiedades magnéticas de los sólidos.
  - 4.8. Seminario.
5. Propiedades físicas de los sólidos (4 horas)
  - 5.1. Transporte de carga: Modelo de Drude y Ley de Ohm.
  - 5.2. Propiedades ópticas de los sólidos. Absorción y emisión de luz. Transiciones Interbanda. Plasmones.
  - 5.3. Propiedades mecánicas de los sólidos: Elasticidad y módulo de Young.
  - 5.4. Seminario.

**VOLUMEN DE TRABAJO**

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	40,00	100
Seminarios	12,00	100
Tutorías regladas	8,00	100
Elaboración de trabajos en grupo	60,00	0
Preparación de clases de teoría	30,00	0
<b>TOTAL</b>	<b>150,00</b>	

**METODOLOGÍA DOCENTE**

Clases teóricas lección magistral participativa

Discusión de artículos.

Debate o discusión dirigida.

Discusión de casos prácticos o problemas en seminario.

Seminarios.

Desarrollo de trabajos individuales.

**EVALUACIÓN**

Asistencia y participación activa en los seminarios.	10-20%
Evaluación continua.	10-20%
Realización de un trabajo individual.	60-70%



Resolución de cuestiones.	10-20%
---------------------------	--------

## REFERENCIAS

### Básicas

- G.A. Ozin, A.C. Arsenault: Nanochemistry. The Royal Society of Chemistry, 2005.
- P.J. Collings, Liquid Crystals: Nature's delicate order of Matter. 2ª Ed., Princeton University Press, 2002.
- Ulman, An Introduction to Ultrathin Organic Films: from Langmuir-Blodgett to Self-Assembly, Academic Press, San Diego, 1991.
- Allen J. Bard, Integrated Chemical Systems: A Chemical Approach to Nanotechnology, Wiley, John & Sons, 1994.
- Nanoscopic Materials. Emil Roduner. RSC Publishing, 2006.
- (UT 1.1) Petrucci. Química general e inorgánica. Tomo 1
- (UT 1.2) Glen E. Rodgers. Química Inorgánica. Introducción a la Química de la Coordinación, del estado sólido y descriptiva. Capítulos 1 a 5
- (UT 1.3.) J. E. McMurry, Organic Chemistry, 8th Edition; Brooks/Cole, 2012
- P. Y. Bruice, Química Orgánica, 8ª Edición; Pearson-Prentice Hall, México, 2008
- (UT 1.4.) Spectrometric Identification of Organic Compounds, R.M. Silverstein, F.X. Webster, D. Kiemle, 7th Ed., John Wiley and Sons, 2004. Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, K. Nakamoto, 6th Ed., John Wiley and Sons, 2009. Libro de tablas: Determinación Estructural de Compuestos Orgánicos. E. Pretsch, P. Bühlmann, C. Afholter, A. Herrera, R. Martínez, Editorial Masson, Barcelona, 2004.

## ADENDA COVID-19

**Esta adenda solo se activará si la situación sanitaria lo requiere y previo acuerdo del Consejo de Gobierno**

<b>1. 1. Contenido /Contingut/ Content</b>
Contents initially included in the teaching guide are maintained.
<b>2. Volum de treball i planificació temporal de la docència</b>
<b>2. Volumen de trabajo y planificación temporal de la docencia</b>

**2. Workload and teaching time planning****3. Metodología docente / Metodología docente/ Teaching Methodology**

The workload of different teaching activities (theory classes, seminars and tutorials) is maintained.

The **theory classes**, which should have been taught intensively in Valencia during two weeks, are being recorded as a slide show with narration. This material will be available to students in a e-learning platform (Master Intranet, Moodle (Aula Virtual) or MSTeams) two weeks before the online lessons. Students will be informed how to access these classes.

All these lessons have a **seminar** part, which is planned to be given online by each professor using the common videoconference programs available in the participating universities (Blackboard collaborate, Teams, Zoom, etc.). This seminar part includes solving practical problems, questions and student doubts related to the subject. The attendance to these online videoconferences will be compulsory for all master students and will be recorded and uploaded in the e-learning platform. This part will be tentatively scheduled in the same period as in-person lectures.

Finally, person to person **tutorials** to answer questions / doubts will be available as in previous years through telephone, E-mail and, additionally, through chats in the e-learning platform.

**4. Avaluació/Evaluación/ Evaluation**

Given that this exam will be carried out by small groups of students in each university (maximum of 14 students in the University of Valencia) and they have been delayed to July, it will be attempted to do it "in person". If the face-to-face examination would not be possible, it will be carried out on-line using the e-learning platform videoconference.

'Questions answering' and 'Attendance and active participation in seminars' will be evaluated during the online seminars.

Students will be informed with at least 10 days in advance if the exams will be done in-person or on-line.



### **5. Bibliografía/Bibliografía/Bibliography**

Some of the recommended bibliography is available online. In case a student wants more detailed information on a specific topic, professors will provide it through scientific articles (to which the Universities are subscribed or published with open-access), doctoral PhD theses in public repositories, etc.