

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	44417
Nom	Introducció al màster en nanociència i nanotecnologia molecular: Conceptes bàsics
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2208 - M.U.Nanoc.Nanot.M.	Facultat de Química	1	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2208 - M.U.Nanoc.Nanot.M.	1 - Introducció al màster en nanociència i nanotecnologia molecular: Conceptes bàsics.	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
CORONADO MIRALLES, EUGENIO	320 - Química Inorgànica

RESUM

L'objectiu d'esta assignatura és assegurar una homogeneïtat en coneixements bàsics de Química i de Física necessaris per a la nanociència independentment de la formació prèvia que tinguen els estudiants matriculats.

CONEIXEMENTS PREVIS**Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació**



No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

2208 - M.U.Nanoc.Nanot.M.

- Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seua capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants siguen capaços d'integrar coneixements i afrontar la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, incloga reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.
- Que els estudiants posseïsquen les habilitats d'aprenentatge que els permeten continuar estudiant d'una forma que haurà de ser en gran manera autodirigida o autònoma.
- Posseir i comprendre coneixements que aportin una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i / o aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.
- Que els estudiants hagen adquirit els coneixements i habilitats necessàries per a seguir futurs estudis de doctorat en Nanociència i Nanotecnologia.
- Que els estudiants d'una àrea de coneixement (p.e. física) siguen capaços de comunicar-se i interaccionar científicament amb col·legues d'altres àrees de coneixement (p.e. química en la resolució de problemes plantejats per la Nanociència i la Nanotecnologia Molecular.
- Conèixer els fonaments de física de l'estat sòlid i de química supramolecular necessaris en nanociència molecular.
- Conèixer les aproximacions metodològiques utilitzades en Nanociència.

L'objectiu d'esta assignatura és assegurar una homogeneïtat en coneixements bàsics de Química i de Física necessaris per a la nanociència independentment de la formació prèvia que tinguen els estudiants matriculats. Estos normalment procediran de graus científics o tecnològics com ara Biologia, Bioquímica o Enginyeria Química, a banda de Química o Física, en els que els continguts i objectius d'este curs es poden haver obtingut en nivells molt diferents.

Es plantegen per als alumnes que seguisquen el curs els següents objectius:

1. Obtindre o demostrar la capacitat de manejar el llenguatge bàsic de l'estructura i enllaç químic de les molècules, tant inorgàniques com orgàniques, incloent les interaccions moleculars no enllaçades.



2. Obtindre o demostrar la capacitat de manejar el llenguatge bàsic de la Química Teòrica i Computacional en relació amb l'objectiu anterior.
3. Obtindre o demostrar coneixement bàsic del càlcul de propietats termodinàmiques a partir de conceptes estadístics.
4. Obtindre o demostrar la capacitat de manejar el llenguatge bàsic de l'estructura i enllaç en estat sòlid.
5. Obtindre o demostrar la capacitat de manejar el llenguatge bàsic de l'estructura electrònica en estat sòlid.
6. Obtindre o demostrar la capacitat de manejar el llenguatge bàsic de l'òptica física en relació amb interacció entre la radiació electromagnètica i el sòlid.
7. Obtindre o demostrar la capacitat de manejar el llenguatge bàsic de les propietats elèctriques i magnètiques.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Conceptes bàsics en química

1. Principis de reactivitat: Equilibri químic (4 hores)
 - a) Conceptes generals sobre dissolucions aquoses
 - b) Introducció a les reaccions d'àcid-base, oxidació-reducció i precipitació.
2. Química de coordinació (9 hores)
 - c) Introducció
 - d) Estructura dels compostos de coordinació
 - e) Teoria de l'enllaç.
 - f) Cinètica i mecanismes de reacció de compostos de coordinació.
3. Química orgànica: (9 HORES)
 - a) Constitució dels compostos orgànics: esquelet hidrocarbonat i grups funcionals. Regles bàsiques de nomenclatura. Conceptes estereoquímics bàsics: Quiralitat i activitat òptica. Conformació i configuració. Enantiòmers i diastereoisòmers.
 - b) Deslocalització electrònica Ressonància. Aromaticitat. Propietats àcid-base dels compostos orgànics: Relació estructura acidesa
 - c) Estructura tridimensional: estereoquímica i quiralitat.
4. Determinació estructural (4 hores).
 - a) Conceptes de Simetria. Grups de simetria.
 - b) Vibracions en Molècules. Espectroscòpia d'infraroig i Raman. Espectres de IR de compostos orgànics i inorgànics: Zones de vibració característiques. Factors que influïxen sobre les freqüències de grup. Principals grups funcionals i freqüències característiques. Enllaç d'hidrogen. Freqüències característiques de compostos de coordinació i organometàlics. Mode de coordinació de lligands. Estereoquímica entorn de l'àtom central.



c) Altres Espectroscòpies i Espectrometries. Ressonància Magnètica Nuclear. Aspectes generals. Descripció bàsica del fenomen de la RMN. Desplaçament Químic. Espectrometria de Masses. Fonaments. Tècniques experimentals en espectrometria de masses.

2. Conceptes bàsics en física.

1. Estructura Cristal·lina i Espai Recíproc (6 hores)
 - 1.1. Interaccions entre els àtoms d'un sòlid
 - 1.2. Estructura cristal·lina: cel·la unitat i xarxes de Bravais
 - 1.3. Tècniques de difracció i espai recíproc
 - 1.4. Seminari
2. Vibracions en Molècules i Cristalls (4 hores)
 - 2.1. Xicotetes oscil·lacions al voltant de l'equilibri
 - 2.2. Modes normals de vibració en molècules
 - 2.3. Sistemes infinits. Equació d'ones. Fonones en cristalls.
 - 2.4. Oscil·lacions amortides, forçades i ressonància.
 - 2.5. Seminari (1 hora)
3. Estructura Electrònica de Sòlids (8 hores)
 - 3.1. Introducció a la Física Quàntica. Funció d'Ones. Operadors i Estats. Amplituds de probabilitat. Equació de Schrödinger.
 - 3.2. Confinament quàntic i estats lligats.
 - 3.3. Bandes en sòlids. Massa efectiva. Densitat d'Estats.
 - 3.4. Seminari.
4. Electromagnetisme en la matèria (8 hores)
 - 4.1. Forces elèctrica i magnètica sobre càrregues en moviment. Força de Lorentz.
 - 4.2. Electroestàtica: Llei de Gauss.
 - 4.3. Magnetostàtica: Llei d'Ampere.
 - 4.4. Inducció electromagnètica: Llei de Faraday.
 - 4.5. Equacions de Maxwell i ones electromagnètiques.
 - 4.6. Constant dielèctrica i polarització: Conductors i dielèctrics.
 - 4.7. Susceptibilitat magnètica i propietats magnètiques dels sòlids.
 - 4.8. Seminari.
5. Propietats físiques dels sòlids (4 hores)
 - 5.1. Transport de càrrega: Model de Drude i Llei d'Ohm.
 - 5.2. Propietats òptiques dels sòlids. Absorció i emissió de llum. Transicions Interbanda. Plasmons.
 - 5.3. Propietats mecàniques dels sòlids: Elasticitat i mòdul de Young.
 - 5.4. Seminari.

**VOLUM DE TREBALL**

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	40,00	100
Seminaris	12,00	100
Tutories reglades	8,00	100
Elaboració de treballs en grup	60,00	0
Preparació de classes de teoria	30,00	0
TOTAL	150,00	

METODOLOGIA DOCENT

Classes teòriques lliçó magistral participativa.

Discussió d'articles.

Debat o discussió dirigida.

Discussió de casos pràctics o problemes en seminari.

Seminaris

Desenvolupament de treballs individuals

AVALUACIÓ

Assistència i participació activa als seminaris.	10-20%
Avaluació continua.	10-20%
Realització d' un treball individual	60-70%
Resolució de qüestions.	10-20%



REFERÈNCIES

Bàsiques

- G.A. Ozin, A.C. Arsenault: Nanochemistry. The Royal Society of Chemistry, 2005.
- P.J. Collings, Liquid Crystals: Nature's delicate of Mater. 2^a 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, 8^a 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. Afolter, A. Herrera, R. Martínez, Editorial Masson, Barcelona, 2004.