

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

Código	44614
Nombre	Materiales avanzados
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	5.0
Curso académico	2021 - 2022

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2218 - M.U. en Química	Facultad de Química	1	Primer cuatrimestre

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2218 - M.U. en Química	9 - Materiales avanzados	Optativa

Coordinación

Nombre	Departamento
ORTI GUILLEN, ENRIQUE	315 - Química Física

RESUMEN

El título de Materiales Avanzados hace referencia a los materiales moleculares y poliméricos utilizados en el campo de la Electrónica Molecular para el desarrollo de dispositivos electrónicos y optoelectrónicos de base orgánica. La Electrónica Molecular emerge en la década de los años 1970-80 como consecuencia del descubrimiento de materiales orgánicos moleculares y poliméricos conductores de la electricidad y representa actualmente una alternativa real a la electrónica convencional basada en materiales metálicos y semiconductores de naturaleza inorgánica. Los materiales orgánicos electroactivos tienen la ventaja de que combinan las ventajas de los sistemas moleculares (tamaño nanoscópico, bajo peso específico, gran versatilidad sintética, transparencia, plasticidad, procesabilidad, biocompatibilidad, ...) con las propiedades eléctricas y ópticas de los metales y semiconductores inorgánicos.

El objetivo de la asignatura es proporcionar una visión general de:

1) Los distintos tipos de materiales orgánicos conjugados, moleculares y poliméricos, conductores de la electricidad. Estos materiales incluyen: a) los complejos y sales de transferencia de carga, b) los oligómeros y polímeros pi-conjugados, entre los que destacan los polímeros conductores tales como el poliacetileno o el politiofeno, c) los macrociclos pi-conjugados tales como las ftalocianinas y d) las nanoestructuras de carbono que incluyen materiales como los fullerenos, los nanotubos y el grafeno



2) Las propiedades estructurales, electrónicas, ópticas y de transporte de carga que presentan estos materiales. Para facilitar la comprensión de estas propiedades, se revisarán los conceptos relacionados con: a) la estructura electrónica y el enlace químico en sistemas carbonados pi-conjugados, abarcando desde los orbitales en sistemas moleculares a la teoría de bandas en sistemas poliméricos, b) la interacción con la luz y especialmente los conceptos relacionados con la espectroscopia electrónica y c) la organización supramolecular y las interacciones intermoleculares.

3) Las principales aplicaciones en dispositivos electrónicos/optoelectrónicos que se derivan de estos materiales. Se explicarán principalmente los principios que gobiernan los dispositivos electroluminiscentes que transforman la corriente eléctrica en luz (OLEDs) y los distintos tipos de células solares utilizadas para transformar la luz en energía eléctrica. Los OLEDs son una realidad comercial en la actualidad, ya que están presentes en las pantallas de todo tipo de dispositivos electrónicos como teléfonos móviles y televisores. Las células solares orgánicas o híbridas, las cuales combinan materiales orgánicos e inorgánicos, están siendo intensamente investigadas como alternativa realista a las células de silicio.

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

Se requieren los conocimientos previos sobre química que se imparten en las titulaciones indicadas en el perfil de ingreso recomendado para el estudiante de Master.

COMPETENCIAS

2218 - M.U. en Química

- 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.
- Ser capaz de resolver problemas complejos de química, sea en el ámbito académico, de la investigación o de la aplicación industrial a nivel de especialización o máster
- Poseer las habilidades necesarias para desarrollar actividades multidisciplinares dentro del ámbito de la química a nivel de especialización de máster.
- Ser capaces de diseñar, realizar, analizar e interpretar experiencias y datos complejos en el entorno de la química a nivel de especialización.



- Adquirir conocimientos avanzados que permitan valorar la importancia de la química en la salud, el medio ambiente, nuevos materiales y energía.
- Adquirir los conocimientos avanzados necesarios para valorar la importancia de la química en el desarrollo económico y social en un contexto de especialización.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

- Ser capaz de valorar el papel de la Química en el diseño y preparación de nuevos materiales moleculares y poliméricos con aplicaciones tecnológicas en sectores de gran impacto económico y social como son el ahorro y la generación de energía.
- Identificar los distintos tipos de materiales moleculares y poliméricos con propiedades conductoras de la electricidad, así como sus métodos de síntesis y sus aplicaciones.
- Conocer los requisitos que han de reunir los semiconductores orgánicos y las propiedades estructurales y electrónicas que los caracterizan.
- Conocer la estructura y propiedades de las distintas nanoformas de carbono: fullerenos, nanotubos, grafeno, etc.
- Comprender las relaciones estructura-propiedad que determinan la potencialidad de los semiconductores orgánicos como materiales eléctrica y ópticamente activos.
- Identificar las interacciones intermoleculares que determinan la organización supramolecular de los materiales moleculares y poliméricos y conocer las implicaciones de dicha organización en las propiedades de transporte de carga.
- Conocer los distintos tipos de mecanismos que regulan el transporte de carga en los semiconductores orgánicos.
- Conocer la arquitectura, los componentes, el funcionamiento y los principios básicos de los dispositivos electroluminiscentes tipo OLED y de las células solares como aplicaciones principales de los semiconductores orgánicos.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

0. Introducción: Aplicaciones principales

Objetivos de la asignatura. Electrónica molecular: desarrollo histórico. Semiconductores orgánicos
Presentación de las aplicaciones principales. Dispositivos para ahorrar energía y para generar energía.

1. Materiales poliméricos

Introducción. Definición de polímero. Historia de los polímeros. Tipos de polímeros según su estructura y según sus propiedades. Mecanismos de polimerización: por etapas o en cadena. Aplicaciones.



2. Estructura electrónica de los semiconductores orgánicos

Conceptos básicos: Orbitales atómicos. Átomos polieletrónicos: El modelo orbital. El átomo de carbono. Estructura electrónica molecular. Orbitales moleculares: sistemas pi-conjugados. Estados electrónicos: estados singlete y triplete. Teoría de bandas.

3. Interacción con la luz

Conceptos generales. Curvas de energía potencial. Espectroscopia electrónica. Procesos fotofísicos. Parámetros fotofísicos. Tipos de luminiscencia.

4. Conductores moleculares

Desarrollo histórico. Dadores de electrones: TTF y sistemas análogos. Aceptores de electrones: TCNQ y sistemas análogos. Complejos de transferencia de carga. Metales moleculares. Superconductores moleculares.

5. Materiales moleculares electroactivos

Tipos de conductores orgánicos. Oligómeros y polímeros pi-conjugados. Sistemas dadores/aceptores de electrones (HTMs/ETMs). Metalomacrociclos: Ftalocianinas y otros macrociclos. Orbitales moleculares: Una herramienta útil. Propiedades estructurales y vibracionales. Propiedades redox: Inyección de cargas. Propiedades ópticas: Absorción y emisión de luz. Aplicaciones.

6. Organización supramolecular y propiedades de transporte

Interacciones no covalentes: fuerzas intermoleculares. Agregados supramoleculares: Propiedades ópticas. Polímeros supramoleculares. Cristales líquidos. Propiedades de transporte.

7. Nanoestructuras de carbono

Introducción: estructuras y nanoestructuras de carbono. Fullerenos: estructura y propiedades. Nanotubos de carbono: estructura y propiedades. Otros tipos de nanoestructuras de carbono. Grafeno. Funcionalización. Aplicaciones.

8. Polímeros conductores

Síntesis y diseño molecular. Estructura electrónica de los polímeros conjugados. Defectos y portadores de carga. Interacción con la luz: propiedades ópticas. Transiciones y estados excitados en polímeros pi-conjugados. Excitaciones en agregados. Electroluminiscencia y emisión estimulada. Estructura de estado sólido: conformación, flexibilidad, cristalinidad, morfología. Estructura de perovskitas orgánicas-inorgánicas.



9. Transporte de carga

Conceptos básicos. Inyección de cargas. Portadores de carga: movibilidades. Teorías de la conducción: modelos de transporte. Fotoconductividad. Conductividad en polímeros dopados. Aplicación de polímeros conductores en bioelectrónica.

10. Aplicaciones y dispositivos

Células solares: tipos de células y principios de funcionamiento. Dispositivos electroluminiscentes: diodos emisores de luz (LEDs). Láseres: principios básicos y funcionamiento. Láseres de polímeros.

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	40,00	100
Tutorías regladas	5,00	100
Seminarios	5,00	100
Elaboración de trabajos individuales	10,00	0
Estudio y trabajo autónomo	35,00	0
Lecturas de material complementario	10,00	0
Preparación de actividades de evaluación	20,00	0
TOTAL	125,00	

METODOLOGÍA DOCENTE

La asignatura se impartirá empleando la siguiente metodología docente:

- Clases magistrales participativas. En estas clases se introducirán los conceptos básicos de la asignatura. Se fomentará la participación activa del alumno mediante el planteamiento de cuestiones relacionadas con la aplicación de conceptos y conocimientos previamente adquiridos por el alumno.
- Tutorías. Se plantean como foros de discusión de los conceptos explicados o de la resolución de los ejercicios propuestos. Se utilizarán para evaluar la comprensión de la asignatura por parte del alumno.
- Seminarios. Abordarán la explicación de temas específicos por parte de los profesores de la asignatura o de profesores invitados. Además, se utilizarán para exponer y discutir los trabajos individuales o grupales propuestos por los profesores.



EVALUACIÓN

Primera convocatoria:

La calificación de la asignatura será la media ponderada de las notas obtenidas en un examen final (75%), el cual versará sobre los conceptos y conocimientos impartidos durante el curso, y en las actividades de evaluación continua realizadas a lo largo del curso (25%). La calificación mínima en cada una de las dos partes de la evaluación debe ser de ser igual o superior a 4.0 para practicar la media.

La calificación de la evaluación continua se realizará en base a la participación y espíritu crítico demostrados en las discusiones planteadas y a los resultados obtenidos en los trabajos y actividades planteados.

La calificación global mínima para aprobar la asignatura será de 5.0.

Segunda convocatoria:

La calificación de la asignatura en segunda convocatoria se obtendrá aplicando los mismos criterios que en la primera convocatoria.

REFERENCIAS

Básicas

- A. Köhler, H. Bässler, *Electronic Processes in Organic Semiconductors. An Introduction*, Wiley-VCH 2015
- M. C. Petty, M. R. Bryce, D. Bloor, (eds), *Introduction to Molecular Electronics*, Blackwell, 1995
- K. Müllen, G. Wegner, (eds), *Electronic Materials: The Oligomer Approach*, Wiley-VCH, 1998
- H.S. Nalwa, (ed), *Handbook of Organic Conductive Molecules and Polymers Vol. 1-4*, John Wiley & Sons, 1977
- T. A. Skotheim, J. R. Reynolds, (eds), *Handbook of Conducting Polymers (3rd ed.) Vol. 1 & 2*, CRC Press, 2007
- M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P. C. Eklund, (eds), *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, Academic Press, 1996.
- J.H. Warner, F. Schäffel, A. Bachmatiuk, M.J. Rummeli, *Graphene: Fundamentals and Applications*, Elsevier, 2012

Complementarias

- I. F. Perepichka, D. F. Perepichka, (eds), *Handbook of Thiophene-Based Materials. Applications in Organic Electronics, Vol. 1 & 2*, Wiley, 2009.



- P. A. Cox, The Electronic Structure and Chemistry of Solids, Oxford University Press, 1987
- M. C. Petty, Molecular Electronics. From Principles to Practice, Wiley, 2007
- Durante el curso se dará bibliografía especializada basada en artículos de revisión publicados en revistas científicas. Durant el curs es facilitarà bibliografia especialitzada basada en articles de revisió publicats en revistes científiques. During the course, specialized bibliography based on review articles published in scientific journals will be given.

ADENDA COVID-19

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

Contenidos

Se mantienen los contenidos inicialmente recogidos en la guía docente.

Volumen de trabajo y planificación temporal de la docencia

Respecto al volumen de trabajo:

Se mantienen las distintas actividades descritas en la Guía Docente pero se modifican las horas de dedicación a cada actividad, como se muestra en la tabla siguiente:

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	40.00	70-100
Tutorías regladas	5.00	70-100
Seminarios	5.00	70-100
Estudio y trabajo autónomo	75.00	0
TOTAL	125.00	



Respecto a la planificación temporal de la docencia

El material para el seguimiento de las clases de teoría/tutorías/seminarios de aula permite continuar con la planificación temporal docente tanto en días como en horario, tanto si la docencia es presencial en el aula como si no lo es.

Metodología docente

Asignaturas de teoría: En las clases de teoría y de tutorías de aula se tenderá a la máxima presencialidad posible, siempre respetando las restricciones sanitarias que limitan el aforo de las aulas al 50% de su ocupación habitual. En función de la capacidad del aula y del número de estudiantes matriculados puede ser necesario que parte de los estudiantes deban seguir las clases de manera síncrona en un aula auxiliar. De plantearse esta situación, los estudiantes asistirán al aula del grupo o aula auxiliar para turnos rotativos semanales (preferentemente por orden alfabético). Sin embargo, el sistema de rotación se fijará una vez conocidos los datos reales de matrícula, garantizándose, en cualquier caso, que el porcentaje de presencialidad de todos los estudiantes matriculados en la asignatura es el mismo.

La metodología utilizada para las clases no presenciales será:

1. De forma síncrona mediante las herramientas del aula virtual (Teams, Blackboard ...)
2. De forma asíncrona mediante powers locutados u otras herramientas del aula virtual
3. Resolución de ejercicios y cuestionarios

Si se produce un cierre de las instalaciones por razones sanitarias que afecte total o parcialmente a las clases de la asignatura, éstas serán sustituidas por sesiones no presenciales siguiendo los horarios establecidos y utilizando las herramientas del aula virtual.

Evaluación

Se mantiene el sistema de evaluación descrito en la Guía Docente de la asignatura en la que se han especificado las distintas actividades evaluables así como su contribución a la calificación final de la asignatura.

Si se produce un cierre de las instalaciones por razones sanitarias que afecte al desarrollo de alguna actividad evaluable presencial de la asignatura ésta será sustituida por una prueba de naturaleza similar que se realizará en modalidad virtual utilizando las herramientas informáticas licenciadas por la Universitat de València. La contribución de cada actividad evaluable a la calificación final de la asignatura permanecerá invariable, según lo establecido en esta guía.



Bibliografía

Se mantiene la bibliografía recomendada en la Guía Docente pues es accesible y se complementa con apuntes, diapositivas y problemas subidos a Aula Virtual como material de la asignatura.

BORRADOR