

## **FICHA IDENTIFICATIVA**

Datos de la Asignatura					
Código	44992				
Nombre	Química de superficies e interfases: experimentación y modelización				
Ciclo	Máster				
Créditos ECTS	6.0				
Curso académico	2021 - 2022				

_						
	111	ПВ	20	$\mathbf{a}$	n	(es)
_		AIC		ıv		

TitulaciónCentroCurso Periodo2245 - M.ErasmMund en Química Teórica y Facultad de Química2 AnualModelización Computacional

Materias			
Titulación	Materia	Caracter	
2245 - M.ErasmMund en Química Teórica	4 - Optativas de segundo	Optativa	
y Modelización Computacional			

#### Coordinación

Nombre Departamento
TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO 315 - Química Física

# **RESUMEN**

Este curso tiene por objeto adquirir un conjunto completo de conocimientos para abordar la química de las superficies de los materiales. Estará ofertado por la Universidad Sorbona de Paris quienes serán los organizadores.

## **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**

#### 2245 - M.ErasmMund en Química Teórica y Modelización Computacional

- 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.
- 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.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- Conocer las teorías y los métodos de cálculo para el estudio de sólidos y superficies; evaluación crítica de su aplicabilidad a problemas de catálisis, magnetismo, conductividad, etc.
- Conocer la existencia de técnicas computacionales avanzadas tales como: canalización de instrucciones y datos, procesadores superescalar y multiescalares, operaciones en cadena, plataformas en paralelo, etc.
- Los estudiantes son capaces de trabajar en equipo tanto a nivel multidisciplinar como con sus propios pares respetando el principio de igualdad de hombre y mujeres.
- Los estudiantes desarrollan un pensamiento y razonamiento crítico y saben comunicarlos de manera igualitaria y no sexista tanto en forma oral como escrita, en su lengua propia y en una lengua extranjera.
- El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.



### **RESULTADOS DE APRENDIZAJE**

Este curso tiene por objeto adquirir un conjunto completo de conocimientos para abordar la química de las superficies de los materiales. Estará ofertado por la Universidad Sorbona de Paris quienes serán los organizadores.

## **DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS**

1.

Este curso está organizado en torno a tres temas principales: fundamentos sobre superficies, descripciones detalladas de técnicas experimentales y teóricas de caracterización y modelización teórica de superficies, ilustradas por varias aplicaciones. Se describirán, compararán y mostrarán las herramientas experimentales y teóricas más utilizadas para la caracterización espectroscópica o microscópica de superficies (es decir, STM, AFM, LEED, XPS, ToF-SIMS, ... y DFT) en el marco de diferentes dominios de aplicación para materiales como la energía, la catálisis, los biomateriales, la corrosión.

a microelectrónica, el transporte, ... Este curso tiene por objeto adquirir un conjunto completo de conocimientos para abordar la química de las superficies de los materiales.

#### **VOLUMEN DE TRABAJO**

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Prácticas en aula informática	20,00	100
Clases de teoría	20,00	100
Tutorías regladas	5,00	100
TOTAL	45,00	

# **METODOLOGÍA DOCENTE**

## **EVALUACIÓN**

#### Convocatoria ordinaria



La nota final de la asignatura se basará en: 20% examen final de la asignatura y un 80% correspondiente a la entrega de un informe de ejercicios propuestos por el profesor.

#### Convocatoria extraordinaria

La evaluación se basará en la entrega de un informe con los ejercicios propuestos.

## **REFERENCIAS**

#### **Básicas**

- H.-J. Butt, K. Graf, M.Kappl, Physics and Chemistry of Interfaces, 2003 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. ISBN 3-527-40413-9.
  - G.T. Barnes, I.R. Gentle, Interfacial Science: an introduction (2 ed.), 2010 Oxford University Press, ISBN on 978-0-19-657118-5.
  - A. J. Bard, L. R. Faulkner, Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications (2 ed.) 2001 John on Wiley and Sons, ISBN: 978-0471043720.

### **ADENDA COVID-19**

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