

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

Codi	44996
Nom	Caracterització de sòlids inorgànics
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	5.0
Curs acadèmic	2023 - 2024

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2249 - Màster Universitari en Química	Facultat de Química	1	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2249 - Màster Universitari en Química	3 - Aplicacions de la Química Inorgànica	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
ABARGUES LOPEZ, RAFAEL	320 - Química Inorgànica

RESUM

L'assignatura “Caracterització de Sòlids Inorgànics” s'imparteix en el primer quadrimestre del M.U. en Química i forma part de la matèria Química Aplicada amb caràcter d'assignatura obligatòria. Té com a objectiu que els/les estudiants adquirisquen la capacitat necessària per a determinar i interpretar les propietats de qualsevol tipus de sòlid inorgànic, com a pas imprescindible per a la seua utilització en l'àmbit científic, tecnològic o industrial. Atés que la duració de l'assignatura no permet cobrir la totalitat de les tècniques de caracterització s'han seleccionat aquelles que són aplicable més general i que són les que proporcionen informació sobre la composició química, estructura cristal·lina, morfologia i comportament tèrmic dels materials. En tots els casos les tècniques objecte d'estudi s'abordaran des dels principis bàsics estrictament necessaris per a entendre el seu funcionament, per a passar immediatament a conèixer els equips i la metodologia de preparació de mostres, per a finalment plantejar una diversitat de supòsits pràctics que aporten experiència en el tractament de les dades.



Entre el conjunt de tècniques que s'estudien es troben les de difracció de raigs X de mostres policristal·lines. En aquest cas es realitzaran experiències d'identificació de fases i anàlisi estructural. Per a la caracterització morfològica es descriuran les tècniques de microscòpia òptica i es descriuran les diferents tècniques de microscòpia electrònica d'escombratge, tant en l'adquisició d'imatges (SEM, TEM i HRTEM), com en la caracterització química per electrons retrodispersats (SEM-EDX i TEM-EDX). Finalment, també s'estudiaran els mètodes d'anàlisi tèrmica, com els termogravimètrics (TGA), l'anàlisi tèrmica diferencial (DTA) i la calorimetria d'escombratge diferencial, fent èmfasi en el maneig de la instrumentació i en la interpretació dels resultats.

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

Es requereixen els coneixements de química impartits en el Grau en Química o en les titulacions indicades en el perfil d'ingrés.

COMPETÈNCIES

2249 - Màster Universitari en Química

- Que els estudiants sàpiguin 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 siguin 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.
- Ser capaç de resoldre problemes complexos de química, siga en l'àmbit acadèmic, de la investigació o de l'aplicació industrial a nivell d'especialització o màster
- Posseir les habilitats necessàries per a desenrotllar activitats multidisciplinàries dins de l'àmbit de la química a nivell d'especialització de màster.
- Fomentar, en contextos acadèmics i professionals de l'àmbit de la política econòmica, l'avanç tecnològic, social o cultural dins d'una societat basada en el coneixement i en el respecte a: a) els drets fonamentals i d'igualtat d'oportunitats entre hòmens i dones, b) els principis d'igualtat d'oportunitats i accessibilitat universal de les persones amb discapacitat i c) els valors propis d'una cultura de pau i valors democràtic.



- Posseir la capacitat de planificar i gestionar temps i recursos i adquirir experiència en la presa de decisions.
- Aplicar els coneixements adquirits en el màster per a identificar oportunitats d'ocupació o emprendimiento en el sector químic.
- Adquirir experiència en l'ocupació de ferramentes d'informació i així com en la gestió de la informació obtinguda.
- Ser capaç de defensar postures en debats i col·loquis de forma rigorosa i raonada.
- Ser capaç de dissenyar, realitzar, analitzar i interpretar experiències i dades complexes, com a especialista.
- Adquirir coneixements teoric-pràctics de diferents tècniques de caracterització avançada que permeten seleccionar amb criteris químics les tècniques més adequades per a la caracterització de sòlids inorgànics a nivell industrial.
- Aplicar els coneixements teoric-pràctics avançats adquirits de les distintes especialitats de la química a la I+D+i.
- Ser capaç d'abordar qualsevol tipus d'investigació en l'àmbit de la química i/o de la indústria química, com a especialista.
- Ser capaç de presentar i defensar públicament els resultats obtinguts en una investigació científica o com resultat del treball en una indústria química.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

- Conèixer els fonaments bàsics de les tècniques de difracció de raigs X, microscòpia electrònica i anàlisi tèrmica.
- Poder seleccionar les tècniques de caracterització que resulten més adequades per a cada cas.
- Saber detallar la metodologia experimental, incloent la selecció de variables experimentals, interpretar els registres obtinguts en cadascuna de les tècniques estudiades.
- Conèixer les aplicacions més rellevants de cada tècnica.
- Conèixer els procediments i programes informàtics per a la interpretació de resultats.
- Saber aplicar els coneixements adquirits per contribuir als Objectius de Desenvolupament Sostenible (ODS's) com la gestió sostenible de l'aigua, matèries primes i fonts d'energia (ODS 6 i 7) i desenvolupar una tasca professional amb el menor impacte ambiental i aprofitant matèries primeres alternatives (ODS 11, 14 i 15)

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Difracció de raigs X

Conceptes bàsics de Cristal·lografia. Difracció de raigs X. Difracció de monocristall vs difracció de pols. Instrumentació. Determinació de paràmetres reticulars. Indexació. Determinació de el grup espacial de simetria. Determinació de l'estructura cristal·lina. Polimorfisme. Identificació i anàlisi quantitativa de fases cristal·lines. Mesura de l'estrès en un sòlid policristal·lí. Mesura de la textura en un sòlid policristal·lí. Mesura de la mida mitjana de partícula d'un sòlid policristal·lí. Ús de base de dades.

**2. Microscòpia electrònica**

Fonaments de microscòpia. Espectre electromagnètic. Interacció de la radiació amb la matèria. Introducció a les tècniques de microscòpia i resolució.

Microscòpia electrònica de rastreig (SEM). Òptica electrònica. Formació d'imatges i interpretació. Maneres de treball i detectors. Microanàlisi per EM-EDX. Anàlisi qualitativa. Preparació de mostres per SEM Aplicació a la caracterització de diverses substàncies inorgàniques, com els materials ceràmics.

Microscòpia electrònica de transmissió (TEM) i d'alta resolució (HRTEM). Parts de l'microscopi. Formació d'imatges, patrons de difracció i correcció d'aberracions. Tècniques: fes paral·lel, STEM. Tècniques analítiques per TEM: microanàlisi per dispersió d'energies de raigs-X (EDX) Espectroscòpia electrònica de pèrdues d'energia (EELS), High Angle Annular Dark Field (HAADF). Preparació de mostres per TEM.

3. Anàlisi tèrmica

Mètodes termogravimètrics (TG), anàlisi tèrmica diferencial (DTA), calorimetria d'escombrat diferencial (DSC), anàlisi mecànica dinàmica (DMA) i dilatomètria: instrumentació i aplicacions en la caracterització tèrmica de mostres inorgàniques i compostes.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	40,00	100
Tutories reglades	10,00	100
Estudi i treball autònom	75,00	0
TOTAL	125,00	

METODOLOGIA DOCENT

L'assignatura s'impartirà en modalitat en línia asíncrona. Les sessions pràctiques, seminaris i tutories se centraran en la resolució de supòsits pràctics d'interès per a diferents sectors industrials, amb una especial atenció al sector ceràmic.

Les sessions pràctiques inclouran material filmat en el laboratori per a familiaritzar-se amb les tècniques descrites i també sessions d'anàlisi i explotació de les dades obtingudes de les diferents tècniques per als supòsits pràctics plantejats.

Es farà ús de la plataforma Aula Virtual, espai virtual on es deposita tota la informació que es considere oportuna per al desenvolupament de la docència i el control de la participació de l'alumnat en les activitats proposades.



AVALUACIÓ

La qualificació de l'assignatura tant per la primera com per a la segona convocatòria s'obtindrà a partir de:

- Exàmens escrits: basades en els resultats de l'aprenentatge i dels objectius de cada assignatura, en la seva part teòrica i / o pràctica que suposaran el 60% de la nota final.
- La preparació i presentació de treballs per part dels estudiants de qüestions plantejades pel professor a la fi de cada tema suposarà el 20% de la nota final.
- L'avaluació contínua de l'activitat desenvolupada per l'estudiant mitjançant l'assistència participativa, resolució de problemes, etc ... comptarà el 20% de la nota final.

La nota necessària per aprovar l'assignatura és de 5 punts.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- Bermúdez J., Métodos de difracción de rayos X. Principios y aplicaciones, Pirámide, 1981.
- Aballe M., J. López Ruiz, J.M. Badía y P. Adeva (eds.), Microscopía Electrónica de Barrido y Microanálisis por Rayos X, CSIC y Rueda, Madrid, 1996.

Complementàries

- Goldstein, J. I. (ed.), Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis. A Text for Biologists, Materials Scientists, and Geologists, Plenum Press, 1981.
- Goodhew, P. J.; Humphreys, F. J., Microscopy and Analysis, Taylor & Francis, 1988.
- Heinrich, K. F. J., Electron Beam X-Ray Microanalysis, Wiley, New York, 1987.
- Klug, H. P.; Alexander, L. E., X-Ray Diffraction Procedures for Polycrystalline and Amorphous Materials, Wiley, 1974.
- Wormald, J., Métodos de difracción, Reverté, Barcelona, 1981.
- Kuo, J., Electron Microscopy Methods and Protocols. Springer Protocols, 2014.
- Brandon, D., Kaplan, W. D., Microstructural Characterization of Materials 2nd Edition Wiley Book, 2008.