



FACULTADE DE QUÍMICA

Master Interuniversitario en Industria e Investigación Química

PROPIEDADES DE MATERIALES

Guía Docente

Guía Docente.

1. Datos descriptivos de la materia.

Módulo: Nanoquímica y Nuevos Materiales

Créditos: 3 ECTS

Profesorado:

Francisco Rivadulla Fernandez

Prof. Titular de Química Física,
USC

Isabel Pastoriza Santos

Prof. Contratada Doctora de Química Física,
UV

Manuel Sánchez Andujar

Prof. Titular de Química Física,
UDC

Idioma en que es impartida: Castellano

2. Situación, significado e importancia de la materia

2.1. Módulo al que pertenece la materia en el Plan de Estudios. Materias con las que se relaciona.

Módulo de Nanoquímica y Nuevos Materiales. Se relaciona fundamentalmente con las asignaturas de dicho módulo.

2.2. Papel que juega este curso en ese bloque formativo y en el conjunto del Plan de Estudios.

Esta asignatura es importante en el módulo de Nanoquímica y Nuevos Materiales, en ella se describen el fundamento teórico de muchas de las propiedades fundamentales de materiales que luego serán estudiadas en las otras asignaturas del módulo.

2.3. Conocimientos previos (recomendados/obligatorios) que los estudiantes han de poseer para cursar la asignatura.

Es recomendable haber cursado anteriormente la asignatura de Profundización en Química Física.

3. Objetivos del aprendizaje y competencias a alcanzar por el estudiante con la asignatura.

3.1. Objetivos del aprendizaje.

- Comprender los aspectos fundamentales de la teoría de sólidos, en lo relacionado con la estructura electrónica y la red cristalina.
- Utilizar las relaciones existentes entre los aspectos fundamentales de la teoría y de las distintas propiedades electrónicas y de la red observadas experimentalmente.
- Comprender la influencia de la dimensionalidad del sistema sobre dichas propiedades.

3.2. Competencias generales.

- 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 sepan comunicar sus conclusiones –y los conocimientos y razones últimas que las sustentan– a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación
- Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química
- Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional
- Valorar la dimensión humana, económica, legal y ética en el ejercicio profesional, así como las implicaciones medioambientales de su trabajo

3.3. Competencias específicas.

- Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química
- Aplicar los materiales y las biomoléculas en campos innovadores de la industria e ingeniería química
- Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.
- Promover la innovación y el emprendimiento en la industria y en la investigación Química.

3.4. Competencias transversales.

- Capacidad para trabajar en grupo tanto en la resolución como en la discusión de problemas.

• 4. Contenidos del curso.

4.1. Epígrafes del curso:

Contenidos teóricos:

Tema 1. - Modelos clásicos y cuánticos de electrones libres: el modelo de Drude y el modelo de Sommerfeld. Efecto del potencial periódico de la red en las propiedades del gas de electrones.

Tema 2. - Cuantización de la energía de red: fonones.

Tema 3. - Clase de técnicas experimentales en la determinación de propiedades de transporte eléctrico y térmico.

Tema 4. - Fenómenos cooperativos en aislantes: Ferroelectricidad y Magnetismo localizado.

Tema 5. - Propiedades ópticas de materiales: aspectos generales. Propiedades ópticas de metales y semiconductores.

4.2. Bibliografía recomendada

- S. Elliot: "The Physics and Chemistry of Solids"
- P. A. Cox: "The Electronic Structure and Chemistry of Solids"
- J. M. Ziman: "Principles of the Theory of Solids"
- J. B. Goodenough: "Magnetism and the Chemical Bond"
- C. F. Bohren and D. R. Huffman: "Absorption and Scattering of light by small particles"

TEMA 1. Modelos clásicos y cuánticos de electrones libres: el modelo de Drude y el modelo de Sommerfeld. Efecto del potencial periódico de la red en las propiedades del gas de electrones.

En este primer tema se introducen las aproximaciones para obtener la conductividad eléctrica, térmica y el efecto Hall en un gas de electrones libres. A continuación se describe el efecto de la cuantización de la energía y el principio de exclusión de Pauli sobre la estadística electrónica y las propiedades del modelo de electrones libres: el modelo de Sommerfeld. El calor específico, y la conductividad eléctrica. Se describen los inconvenientes de los modelos de electrones libres y la necesidad de tener en cuenta la interacción de los electrones con el potencial periódico de la red cristalina para describir sistemas reales.

A continuación se explican las zonas de Brillouin, el teorema de Bloch y se formula una teoría de bandas para electrones libres. Densidad de estados electrónicos.

Por último se demuestra como la aparición de gaps de energía prohibida en las bandas de estados electrónicos son una consecuencia de la interacción con ese potencial periódico.

TEMA 2. Cuantización de la energía de red: fonones

En este tema se explica la cuantización de la energía de red y se calcula la relación de dispersión para una red monoatómica unidimensional en la aproximación del oscilador armónico (velocidad del sonido y conductividad térmica).

Se introduce el efecto de romper la simetría (dos átomos distintos, más de una dimensión, etc) sobre la relación de dispersión: modos ópticos y acústicos.

Se introduce el modelo de Debye para la conductividad térmica y la expansión térmica.

TEMA 3. Técnicas experimentales en la determinación de propiedades de transporte eléctrico y térmico.

Se explicarán los aspectos fundamentales de las principales técnicas experimentales en la determinación de propiedades de transporte eléctrico y térmico en sólidos: conductividad eléctrica, conductividad térmica, poder termoeléctrico y efecto Hall.

TEMA 4. Fenómenos cooperativos en aislantes: Ferroelectricidad y Magnetismo localizado.

Se introducen los fenómenos de polarización y el concepto de constante dieléctrica. Se hará un tratamiento general de este fenómeno para que los estudiantes comprendan la relación en el tratamiento de fenómenos similares como la susceptibilidad magnética.

Ecuación de Clausius-Mossotti y ecuación de Debye (dipolos inducidos y permanentes).

Origen de los materiales ferroeléctricos y su fenomenología. Efecto del tamaño del sistema sobre la ferroelectricidad.

El origen del momento magnético y los distintos tipos de respuesta a un campo aplicado. La función de Brillouin.

Interacción de intercambio y el origen de la magnetización espontánea: Ferromagnetismo.

Efecto de la energía magnetostática sobre la energía total del sistema y la formación de dominios magnéticos. Sistemas monodominio y fenomenología de sistemas magnéticos

nanoestructurados.

TEMA 5. Propiedades ópticas de materiales: aspectos generales. Propiedades ópticas de metales y semiconductores.

Plasmones: excitaciones del gas de electrones libres. Cálculo de la frecuencia de resonancia de plasma en un metal. Plasmones masivos, superficiales y localizados. Teoría de Mie y teoría de Gans. Métodos numéricos. Efecto de la reducción de la dimensionalidad sobre las propiedades ópticas. Band gaps directos e indirectos. Excitones. Puntos cuánticos (nanopartículas) etc.

5. - Indicaciones metodológicas y atribución de carga ECTS.

5.1. Atribución de créditos ECTS.

| TRABAJO PRESENCIAL EN EL AULA | HORAS | TRABAJO PERSONAL DEL ALUMNO | HORAS |
|--|-----------|---|-----------|
| Clases expositivas en grupo grande | 16 | Estudio autónomo individual o en grupo | 36 |
| Clases interactivas en grupo reducido (Seminarios) | 4 | Resolución de ejercicios, u otros trabajos | 12 |
| Tutorías en grupo muy reducido | 1 | Preparación de presentaciones orales, escritas, elaboración de ejercicios propuestos. Actividades en biblioteca o similar | 6 |
| Total horas trabajo presencial en el aula o en el laboratorio | 21 | Total horas trabajo personal del alumno | 54 |

El trabajo personal (no presencial) del alumno, se divide en 36 horas de estudio personal y 18 horas de actividades relacionadas con trabajos dirigidos y supervisados por el profesor.

5.2. Actividades formativas en el aula con presencia del profesor

A) *Clases expositivas en grupo grande* ("L" en las *tablas horarias*): Lección impartida por el profesor que puede tener formatos diferentes (teoría, problemas y/o ejemplos generales, directrices generales de la materia...). El profesor puede contar con apoyo de medios audiovisuales e informáticos pero, en general, los estudiantes no necesitan manejarlos en clase.

B) *Clases interactivas en grupo reducido* (Seminarios, "S" en las *tablas horarias*): Clase teórico/práctica en la que se proponen y resuelven aplicaciones de la teoría, problemas, ejercicios, etc. El alumno participa activamente en estas clases de distintas formas: entrega de ejercicios al profesor, exposición de trabajos, clases prácticas, etc. Se incluyen las pruebas de evaluación si las hubiere. La asistencia a estas clases es obligatoria.

c) *Tutorías de pizarra o de laboratorio en grupo muy reducido* ("T" en las *tablas horarias*): Tutorías programadas por el profesor en las que se proponen actividades como la exposición de trabajos realizados por los alumnos, aclaración de dudas sobre teoría, debate o comentario de trabajos individuales o realizados en pequeños grupos. En muchos casos el profesor exigirá a los alumnos la entrega de ejercicios previa a la celebración de la tutoría. El horario se acordará con los alumnos.

5.3. Recomendaciones para el estudio de la materia

- Es muy importante asistir a todas las clases.
- La resolución de problemas y ejercicios de autoevaluación es clave para el aprendizaje de esta materia. Puede resultar de ayuda empezar por los problemas resueltos en los manuales de apoyo y de referencia, para seguir después con los problemas propuestos al final de cada capítulo en el Manual de referencia.
- Es imprescindible consultar la bibliografía y tratar de completar con aspectos avanzados los conceptos más fundamentales que se expliquen en la clase.

- 5.4. Calendario de actividades.

Diciembre 2014

| Lunes | Martes | Miércoles | Jueves | Viernes |
|-----------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------|--|-----------------------------------|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
| | | | 18-20 L1-2 F. Rivadulla | 18-20 L3-4 F. Rivadulla |
| 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
| | 18-20 L5-6 F. Rivadulla | 18-20 S1-2 F. Rivadulla | 18-20 L7-8 M. Sánchez | 18-20 L9-10 M. Sánchez |
| 15 | 16 | 17 | 18 | 19 |
| 18-20 L11-12 M. Sánchez | 18-20 L13-14 I. Pastoriza | 18-20 L15-16 I. Pastoriza | 18-20 S3-4 I. Pastoriza/M. Sánchez | 18-20 Tutoría |

Exámen: Semana del 5-9 Enero de 2015

6. Indicaciones sobre la evaluación.

6.1. Procedimiento de evaluación.

La evaluación de esta materia se hará mediante evaluación continua y la realización de un examen final.

La evaluación continua tendrá un peso de entre el 25% y el 40% en la calificación de la asignatura. El resto se asignará al resultado en el examen final.