
Máster Interuniversitario en Química Aplicada

DATOS DE LA ASIGNATURA

Fundamental

Especialidad

Denominación: Espectroscopía y modelización molecular. Aplicación al diseño racional de polímeros

Código:

Plan de Estudios: Master Interuniversitario en Química Aplicada

Créditos ECTS: 4

Cuatrimestre: 2º

Horas de trabajo presencial:

Horas de trabajo no presencial:

Idioma en que se imparte:

Plataforma virtual:

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

El alumnado:

- Conocerá los métodos teóricos basados en campos de fuerza, función de ondas y teoría del funcional de la densidad.
- Será capaz de utilizar las técnicas computacionales apropiadas para predecir propiedades moleculares y macroscópicas.
- Sabrá aplicar los conocimientos adquiridos al diseño racional de polímeros con interés en optoelectrónica.
- Conocerá los fundamentos de las espectroscopías vibracional y electrónica aplicadas a la caracterización de polímeros.
- Será capaz de aplicar los conocimientos adquiridos en la determinación de propiedades optoelectrónicas de sistemas de interés en nanotecnología.

CONTENIDOS

- Métodos de modelización molecular
- Predicción de propiedades moleculares y macroscópicas
- Aplicación al diseño racional de polímeros con interés en optoelectrónica
- Espectroscopía vibracional de polímeros.
- Propiedades optoelectrónicas de polímeros.

OBSERVACIONES

Las competencias específicas de esta materia son:

CEM1: Conocer los métodos teóricos de la química computacional y su aplicación en el cálculo de propiedades moleculares y macroscópicas de compuestos químicos.

CEM2: Saber identificar los descriptores químicos implicados en el diseño racional de polímeros en función de sus aplicaciones.

CEM3: Conocer los fundamentos de las espectroscopías vibracional y electrónica aplicadas al estudio de polímeros de interés en nanotecnología.

CEM4: Saber relacionar la estructura molecular y las propiedades optoelectrónicas de los compuestos químicos con sus posibles aplicaciones.

COMPETENCIAS

Competencias Básicas y Generales:

Código	Competencia
CG5	Que los estudiantes sepan interpretar los resultados experimentales a la luz de teorías aceptadas y emitir hipótesis conforme al método científico y defenderlas de forma argumentada.
CB6	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.
CB7	Que los 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.

Competencias Transversales:

Código	Competencia
CT2	Que el estudiante sepa utilizar herramientas de información y comunicación que permitan plantear y resolver problemas nuevos dentro de contextos relacionados con su área de estudio

Competencias Específicas:

ACTIVIDADES FORMATIVAS

Clases teóricas	30	100
Trabajo no presencial	70	0

METODOLOGÍAS DOCENTES

Actividades presenciales (dirigidas y/o supervisadas)
Actividades no presenciales

SISTEMAS DE EVALUACIÓN

Sistema de Evaluación	Ponderación Mínima	Ponderación Máxima
Evaluación continua	25	75
Examen final	25	75

BIBLIOGRAFÍA

- D. Frenkel, B. Smit, *Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications*, 2nd Ed. Academic Press, 2002.
- V. Galiatsatos Ed. *Molecular Simulation Methods for Predicting Polymer Properties*. Wiley-Interscience, 2005.
- M. Kotelyanskii, D. N. Theodorou, Ed. *Simulation Methods for Polymers*. Marcel Dekker Inc., 2004.
- A. Hinchliffe, *Molecular Modelling for Beginners*, 2nd Ed. Wiley-Interscience, 2003.
- N. J. Everall, J. M. Chalmer, P. R. Griffiths, Eds. *Vibrational Spectroscopy of Polymers: Principles and Practice*. John Wiley & Sons, 2007.
- J. L. Koenig, *Spectroscopy of Polymers*, 2nd Ed. Elsevier Science, 1999.
- D. I. Bower, W. F. Maddams, *The Vibrational Spectroscopy of Polymers*. Cambridge University Press, 1992.
- A. Köhler, H. Bässler, *Electronic processes in organic semiconductors: An introduction*. Wiley-VCH, 2015.
- S.-S. Sun, L. R. Dalton, *Introduction to organic electronic and optoelectronic materials and devices*, CRC Press, Taylor & Francis, 2008.
- T. A. Skotheim, J. R. Reynolds, *Conjugated Polymers. Processing and applications*. CRC Press, Taylor & Francis, 2007.
- T. A. Skotheim, J. R. Reynolds, *Conjugated Polymers. Theory, synthesis, properties and characterization*. CRC Press, Taylor & Francis, 2007.
- A. Qin, B. Z. Tang, *Aggregation-Induced Emission: Fundamentals*. Wiley, 2014.