

# **Escuela de Doctorado y Estudios de Posgrado**

## **Máster Universitario en Química**

### **GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA :**

**Superficies: estructuras y técnicas para su caracterización  
(2018 - 2019)**

## 1. Datos descriptivos de la asignatura

<b>Asignatura:</b> Superficies: estructuras y técnicas para su caracterización	<b>Código:</b> 325561202
<ul style="list-style-type: none"><li>- Centro: <b>Escuela de Doctorado y Estudios de Postgrado</b></li><li>- Lugar de impartición: <b>Facultad de Ciencias. Sección de Química</b></li><li>- Titulación: <b>Máster Universitario en Química</b></li><li>- Plan de Estudios: <b>2013 (Publicado en 2014-04-29)</b></li><li>- Rama de conocimiento: <b>Ciencias</b></li><li>- Itinerario / Intensificación:</li><li>- Departamento/s: <b>Química</b></li><li>- Área/s de conocimiento: <b>Química Física</b></li><li>- Curso: <b>1</b></li><li>- Carácter: <b>Obligatoria</b></li><li>- Duración: <b>Segundo cuatrimestre</b></li><li>- Créditos ECTS: <b>3,0</b></li><li>- Modalidad de impartición: <b>Presencial</b></li><li>- Horario: <b>Enlace al horario</b></li><li>- Dirección web de la asignatura: <b><a href="http://www.campusvirtual.ull.es">http://www.campusvirtual.ull.es</a></b></li><li>- Idioma: <b>Castellano e Inglés (0,15 ECTS en Inglés)</b></li></ul>	

## 2. Requisitos para cursar la asignatura

Ninguno

## 3. Profesorado que imparte la asignatura

<b>Profesor/a Coordinador/a:</b> MARIA PILAR ENCARNACION CARRO REGLERO	
<ul style="list-style-type: none"><li>- Grupo: <b>Único</b></li><li>- Departamento: <b>Química</b></li><li>- Área de conocimiento: <b>Química Física</b></li></ul>	
Tutorías Primer cuatrimestre:	
<b>Horario:</b>  Martes, miércoles y jueves 12:00 a 14:00 h	<b>Lugar:</b>  Despacho 17 de la U.D. de Química Física (Departamento de Química), 3º planta de Química
Tutorías Segundo cuatrimestre:	

**Horario:**

Martes, miércoles y jueves 12:00 a 14:00 h

- Teléfono (despacho/tutoría): **922318031**
- Correo electrónico: **pcarro@ull.es**
- Web docente: **<http://www.campusvirtual.ull.es>**

**Lugar:**

Despacho 17 de la U.D. de Química Física (Departamento de Química), 3º planta de Química

**Profesor/a: MARIANO J. PEREZ SANCHEZ**

- Grupo: **Único**
- Departamento: **Química**
- Área de conocimiento: **Química Física**

Tutorías Primer cuatrimestre:

**Horario:**

Lunes de 14:30 a 16:30 h, miércoles y viernes de 16:00 a 18:00 h

**Lugar:**

Despacho 11 de la U.D. de Química Física (Departamento de Química), 3º planta de Química

Tutorías Segundo cuatrimestre:

**Horario:**

Lunes de 14:30 a 16:30 h, miércoles y viernes de 16:00 a 18:00 h

**Lugar:**

Despacho 11 de la U.D. de Química Física (Departamento de Química), 3º planta de Química

- Teléfono (despacho/tutoría): **922318025**
- Correo electrónico: **mjperez@ull.es**
- Web docente: **<http://www.campusvirtual.ull.es>**

**Profesor/a: ALBERTO HERNANDEZ CREUS**

- Grupo: **Único**
- Departamento: **Química**
- Área de conocimiento: **Química Física**

Tutorías Primer cuatrimestre:

**Horario:**

Martes, miércoles y jueves de 14:30 a 16:30 h

**Lugar:**

Despacho 7 de la U.D. de Química Física (Departamento de Química), 3º planta de Química

Tutorías Segundo cuatrimestre:

**Horario:**

Martes, miércoles y jueves de 14:30 a 16:30 h

**Lugar:**

Despacho 7 de la U.D. de Química Física (Departamento de Química), 3º planta de Química

- Teléfono (despacho/tutoría): **922318021**
- Correo electrónico: **ahcreus@ull.es**
- Web docente: **<http://www.campusvirtual.ull.es>**

**Profesor/a: JOSE LUIS RODRIGUEZ MARRERO**

- Grupo: **Unico**
- Departamento: **Química**
- Área de conocimiento: **Química Física**

Tutorías Primer cuatrimestre:

**Horario:**

Lunes, martes y miércoles de 15:00 a 17:00 h

**Lugar:**

Despacho 16 de la U.D. de Química Física (Departamento de Química), 3º planta de Química

Tutorías Segundo cuatrimestre:

**Horario:**

Lunes, martes y miércoles de 15:00 a 17:00 h

**Lugar:**

Despacho 16 de la U.D. de Química Física (Departamento de Química), 3º planta de Química

- Teléfono (despacho/tutoría): **922318030**
- Correo electrónico: **jlrquez@ull.es**
- Web docente: **<http://www.campusvirtual.ull.es>**

#### 4. Contextualización de la asignatura en el plan de estudio

Bloque formativo al que pertenece la asignatura: **Técnicas Experimentales**  
Perfil profesional:

#### 5. Competencias

##### Específica

**CE01** - Aplicar las técnicas instrumentales más adecuadas para la identificación, cuantificación, separación, caracterización y determinación estructural

**CE05** - Desarrollar habilidades teórico-prácticas para relacionar la estructura con las propiedades de sustancias de diferente complejidad

**CE10** - Manejar los conceptos básicos y la metodología empleada en química computacional

**CE11** - Conocer los principios de la Química Física de Superficies y sus aplicaciones

**CE15** - Elaborar una memoria clara y concisa de los resultados de su trabajo y de las conclusiones obtenidas

##### General

**CG01** - Tener habilidad en el empleo de las principales fuentes de información y documentación, incluyendo el manejo de bases de datos e internet

#### Básica

**CB06** - 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

**CB07** - 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

**CB09** - 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

**CB10** - 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

## 6. Contenidos de la asignatura

### Contenidos teóricos y prácticos de la asignatura

Prof. Pilar Carro

Tema 1. Introducción al estudio de superficies. Estructura de las superficies sólidas: redes y celdas unidad. Identificación de planos cristalinos: Índices de Miller. Reconstrucción y relajación superficial. Fisorción y quimisorción. Cinética de la adsorción. Estructura de los adsorbatos. Isotermas de adsorción. Cálculos teóricos aplicados al estudio de superficies y procesos de adsorción.

Tema 2. Química cuántica aplicada al estudio de superficies y procesos de adsorción. Modelos de clúster. Modelos periódicos. Análisis del enlace de quimisorción.

Prof. Mariano Sánchez

Tema 3. Espectroscopía Fotoelectrónica de Rayos X (XPS). Espectroscopía Electrónica Auger (AES). Espectroscopía Fotoelectrónica Ultravioleta (UPS).

Prof. José Luis Rodríguez

Tema 4: Microscopio electrónico de barrido (SEM). Determinación elemental en superficies (EDX). Microscopio electrónico de transmisión (TEM).

Prof. Alberto Hernández

Tema 5: Técnicas de barrido de sonda SPM: Microscopía de efecto túnel (STM), Microscopía de fuerzas atómicas. (AFM). Introducción a la microscopía electroquímica (EQM).

Práctica 1: Obtención de un espectro por XPS para materiales conductores y no conductores electrónicos: características e interpretación. Prof. Mariano Sánchez

Práctica 2: Obtención de un espectro por SEM-EDAX: micro-observación y análisis elemental en muestras metálicas sometidas a deterioro. Características e interpretación. Prof. José Luis Rodríguez

Práctica 3: Obtención de resolución atómica en grafito. Obtención de diversas topografía conductoras y no conductoras, de nanodominios magnéticos y de contrastes de fase. Prof. Alberto Hernández

Las prácticas de esta asignatura programadas usando algunos de los servicios del SEGAI, se realizarán obligatoriamente en el horario oficialmente establecido para dichos servicios.

#### Actividades a desarrollar en otro idioma

En las tutorías se propondrán ejercicios en inglés de respuesta obligada en inglés.  
Entre las actividades realizadas en las prácticas por los alumnos, tienen que analizar, comentar y discutir publicaciones científicas en inglés

## 7. Metodología y volumen de trabajo del estudiante

### Descripción

La metodología utilizada en la asignatura es la siguiente:

- Clases magistrales. De acuerdo con el programa presentado se desarrollarán 10 clases magistrales orientadas a explicar los aspectos básicos del temario y facilitar al alumno información actualizada y bien organizada procedente de diversas fuentes que en algunos casos puede resultarle de difícil acceso. En las explicaciones se hará uso de los medios audiovisuales disponibles, principalmente el cañón de proyección, material impreso, etc.
- Prácticas en el laboratorio. Están previstas 16 clases en laboratorio junto a los equipos científicos a los que se hace mención en el programa. En las prácticas se abordarán la mayor cantidad posible de los aspectos prácticos relacionados con cada una de las técnicas que se explican: preparación de muestras, funcionamiento de aparatos, la aplicación y limitaciones de las técnicas e instrumentos, análisis de los resultados obtenidos, etc. Una vez finalizadas las clases de laboratorio, los alumnos elaborarán un informe detallado de cada una de las unidades prácticas realizadas, presentando un análisis crítico de los resultados obtenidos y las conclusiones alcanzadas.
- Tutorías (2 horas). Las tutorías se considerarán periodos de instrucción y orientación realizados por el profesor con el objetivo de revisar y discutir los materiales y temas presentados en las clases, seminarios, lecturas, realización de trabajos, preparación de exposiciones, etc. Se podrán realizar en pequeños grupos o incluso de forma individualizada si las circunstancias así lo aconsejen.

### Actividades formativas en créditos ECTS, su metodología de enseñanza-aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante

Actividades formativas	Horas presenciales	Horas de trabajo autónomo	Total horas	Relación con competencias
Clases teóricas	10,00	0,00	10,0	[CB06], [CB07], [CB09], [CB10], [CE01], [CE05], [CE10], [CE11]
Clases prácticas (aula / sala de demostraciones / prácticas laboratorio)	16,00	0,00	16,0	[CB06], [CB07], [CB09], [CG01], [CE01], [CE05], [CE10], [CE11], [CE15]

Realización de exámenes	2,00	0,00	2,0	[CB07], [CE01], [CE05], [CE10], [CE11]
Asistencia a tutorías	2,00	0,00	2,0	[CB07], [CE01], [CE05], [CE10], [CE11]
Estudio autónomo	0,00	35,00	35,0	[CG01], [CE01], [CE05], [CE10], [CE11], [CE15]
Preparación de seminarios, elaboración de memorias y/o informes de las prácticas realizadas, resolución de ejercicios que le haya entregado el profesor, preparación de debates, preparación de exposición oral, lecturas recomendadas, búsquedas bibliográfica	0,00	10,00	10,0	[CB06], [CG01], [CE01], [CE05], [CE10], [CE11], [CE15]
Total horas	30.0	45.0	75.0	
Total ECTS			3,00	

## 8. Bibliografía / Recursos

### Bibliografía Básica

- Química Teórica y Computacional. Juan Andrés y Juan Beltrán, Eds., "Colección Ciencias experimentales", Universitat Jaume I., Castelló de la Plana, 2000.
- Computational Chemistry Workbook, Thomas Heine, Jan-Ole Joswing, Achim Gelessus, Wiley-VCH, Viena 2009.
- Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis, Graham Lawes, John Wiley & Sons, 1987.
- Microscopía electrónica de barrido y Microanálisis por rayos, X. M. Aballe y otros, Madrid, CSIC, Rueda, D.L. 1996.
- Surfaces, G. Attard y C. Barnes, Oxford University Press (OCP), Oxford, reed. 2009.
- Scanning Probe Microscopies Beyond Imaging, Paolo Samorí, Ed. Wiley-VCH 2006.

### Bibliografía Complementaria

- NIX, R. An Introduction to Surface Chemistry, <http://www.chem.qmul.ac.uk/surfaces/sccl/>
- Scanning Electron Microscopy and X Ray Microanalysis, Joseph I. Goldstein et al. Ed. PLENUM PRESS, 1992.
- An Introduction to Surface Analysis by XPS and AES, John F. Watts, John Wolstenholme, Wiley, 2003.

Otros Recursos

**9. Sistema de evaluación y calificación**

**Descripción**

La calificación de la convocatoria de junio se basará en la evaluación continua que consta de los siguientes elementos:

- Asistencia y participación activa en todas las actividades de la asignatura y la preparación y defensa de los correspondientes informes que sean solicitados a los alumnos: 70%
- Prueba final escrita: 30%

En el resto de las convocatorias se realizará una evaluación única que consistirá en un examen teórico-práctico sobre los contenidos de la asignatura y su calificación final será la correspondiente a dicho examen. En el supuesto de que se hubiesen superado, la calificación de las prácticas de laboratorio obtenida en la evaluación continua se tendrá en cuenta en la evaluación única.

**Estrategia Evaluativa**

Tipo de prueba	Competencias	Criterios	Ponderación
Informes memorias de prácticas	[CB07], [CG01], [CE01], [CE15]	SE7 - Evaluación de las actividades no presenciales relacionadas con las clases de laboratorio: memorias y/o informes de las prácticas entregados. Se valorará: - Dominio de los contenidos de la asignatura. - Entrega del informe en el plazo establecido. - Estructura, originalidad y presentación. - Discusión e interpretación de los resultados. - Rigor en la expresión, en los cálculos y en los resultados.	30 %
Técnicas de observación	[CB06], [CB07], [CB09], [CB10], [CE01], [CE05], [CE10], [CE11]	SE1 – Evaluación continua (20%): Control de asistencia y participación activa en todas las actividades de la asignatura  SE5 - Evaluación continua del estudiante en las clases de laboratorio (20%): asistencia participativa, manipulación del material y equipos, organización del trabajo, comprensión y empleo del guión de prácticas, realización de cálculos, trabajo en equipo, etc.  Se valorará la destreza, limpieza, orden y método en el laboratorio así como la participación en el trabajo grupal.	40 %

Examen final	[CB06], [CB09], [CE01], [CE05], [CE10], [CE11]	SE11 – Examen Final: Pruebas Escritas (pruebas objetivas, pruebas de respuesta corta y/o pruebas de desarrollo) Se valorará: - Conocimiento. - Presentación. - Capacidad de análisis y síntesis. - Claridad en la exposición. - Razonamiento crítico	30 %
--------------	---	--	------

## 10. Resultados de Aprendizaje

- Describir el estado de una superficie, su simulación computacional y la complejidad de los procesos básicos de adsorción y desorción que ocurren en las mismas, así como relacionar la descripción y propiedades de una superficie con la escala macro, micro y nanométrica.
- Describir el fundamento de las técnicas y los componentes básicos de los equipos estudiados, cómo funcionan, sus ventajas y limitaciones así como qué tipo de información puedan dar y cómo interpretar esta información.

## 11. Cronograma / calendario de la asignatura

### Descripción

La fecha en que se realizarán la prueba final contemplada en la evaluación continua de la convocatoria de enero y la evaluación única en las diferentes convocatorias se puede consultar en <https://www.ull.es/masteres/quimica/>

Por último, hay que tener en cuenta que la distribución de los temas por semana en el cronograma es orientativa, pudiendo sufrir cambios según las necesidades de organización docente.

### Segundo cuatrimestre

Semana	Temas	Actividades de enseñanza aprendizaje	Horas de trabajo presencial	Horas de trabajo autónomo	Total
Semana 1:	Tema 1 Tema 2	Clases de teoría y ejercicios Clase de teoría y ejercicios	9.00	13.50	22.50
Semana 2:	Tema 2 Tema 3	Clases de teoría y ejercicios Clases de teoría Tutoría	6.00	9.00	15.00
Semana 3:	Tema 4 Tema 5	Clases de teoría y ejercicios Clases de teoría Tutoría	4.00	6.00	10.00

Semana 4:	Tema 3, tema 4, tema 5	Prácticas de laboratorio	9.00	13.50	22.50
Semana 16 a 18:	Evaluación	Examen final	2.00	3.00	5.00
Total			30.00	45.00	75.00