QUÍMICA DE LOS MATERIALES

12 CRÉDITOS

OBJETIVOS

En este curso se presentan los elementos de estructura electrónica y molecular de las sustancias químicas necesarios para el estudio de los materiales. La idea fundamental es que los alumnos provenientes de diferentes carreras como física, ingeniería o química adquieran la base necesaria para incursionar en el estudio de los materiales. Para este curso se requiere que los estudiantes tengan conocimientos de química general, computación básica y álgebra lineal. Un alumno que no cursó materias de química en la licenciatura deberá cursar y aprobar la asignatura de Introducción a la Química de los Materiales. Este curso tiene una orientación teórica y requiere de 10 a 12 horas semanales de estudio.

TEMARIO

1. Ecuación de Schrödinger para un electrón en un pozo de potencial. (horas)
   1.1. Función de onda. Condiciones en la frontera para la función de onda.
   1.2. Principio de incertidumbre de Heisenberg.

2. Átomo de hidrógeno, números cuánticos. (horas)
   2.1. Átomos multielectrónicos.

3. Enlace químico. (horas)
   3.1. Simetría de la función de onda.
   3.2. Fermiones y bosones.

4. Periodicidad. (horas)
   4.1. Propiedades electrónicas.
   4.2. Potencial de ionización, afinidad electrónica.
   4.3. Electronegatividad y carga nuclear efectiva.

5. Método de Hartree-Fock. (horas)
   5.1. Métodos post-Hartree-Fock.
   5.2. Teoría de orbitales moleculares (LCAO-MO).
   5.3. Método de Hückel.
   5.4. Enlace según la teoría LCAO-MO.
   5.5. Enlace covalente y enlace iónico.
   5.6. Enlaces de coordinación.
   5.7. Fuerzas intermoleculares.

6. Teoría de Fukui de orbitales frontera. (horas)
   6.1. Teoría de ácidos y bases basada en la teoría de Fukui.
   6.2. Ácidos y bases duros y blandos.

7. Teoría de enlace de valencia. (horas)

7.1. Hibridación y geometría molecular, teoría de resonancia, conjugación, efecto inductivo.

8. Teoría de bandas. (horas)
8.1. Aislantes, semiconductores y metales.
8.2. Banda prohibida y su anchura.
8.3. Densidad de estados.
8.4. Dopaje.
8.5. Semiconductores tipo n y tipo p.
8.6. Diodos y fotocunductividad.
8.7.Sólidos unidimensionales y bidimensionales, metales sintéticos.
8.8. Poliacetileno, polianilina y pares orgánicos conductores.

9. Modelado Molecular. (horas)
9.1. Mecánica molecular clásica.
9.2. Métodos semiempíricos.
9.3. Métodos ab-initio.
9.4. Métodos de funcionales de la densidad.
9.5. Bases.
9.6. Gaussian, NW-Chem, Spartan, Jaguar, Monte Carlo y métodos estadísticos.

BIBLIOGRAFÍA

1. Atkins P. W., *Physical Chemistry*, 7th ed. New York : W.H. Freeman, c2002.

2. Pope, Martin and Charles E. Swenberg. *Electronic Processes in Organic Crystals and Polymers,* 2nd ed. New York : Oxford University Press, (Monographs on the physics and chemistry of materials ; #56.),1999.

3. Leach, Andrew R., http://www.amazon.com/exec/obidos/search-handle-url/102-6235300-5162514?%5Fencoding=UTF8&search-type=ss&index=books&field-author=Andrew%20Leach*Molecular Modelling: Principles and Applications,* 2nd ed. Harlow, England ; New York : Prentice Hall, 2001.