



## TEMARIO TEÓRICO: QUÍMICA DEL ESTADO SÓLIDO

Tema 1.- Estructura reticular. Introducción. Clasificación de los sólidos. Modelo de los empaquetamientos. Modelo de los poliedros de coordinación. Descripción cristalográfica de los sólidos. Polimorfismo, Alotropía e Isomorfismo

Tema 2.- Estructura electrónica. Teoría de Bandas. Aproximación CLOA. Modelo del Electrón Cuasi-libre. Bandas Electrónicas en sólidos metálicos, iónicos y covalentes. Los metales de transición y sus compuestos. Sólidos moleculares. Propiedades eléctricas, magnéticas y ópticas.

Tema 3.- Defectos reticulares. Agitación térmica (fonones). Defectos Puntuales Intrínsecos (Schottky y Frenkel). Defectos extrínsecos. Conductividad Iónica. Electrolitos sólidos. Sensores químicos y baterías en estado sólido. Interacción de defectos puntuales. Defectos Reticulares No Puntuales.

Tema 4.- Defectos electrónicos. Distribución de Fermi-Dirac de los electrones. El par electrón-hueco. Defectos extrínsecos. Semiconductividad eléctrica. Semiconductores de valencia mixta. Interacción de defectos puntuales. Defectos electrónicos no puntuales. Uniones p-n. Aplicaciones prácticas.

Tema 5.- Reactividad en estado sólido. Control termodinámico. Diagramas de Fases. Control cinético: Parámetros de reacción. Clasificación en función del producto de reacción, de los reactivos, y de la extensión de la reacción.

Tema 6.- Formación de compuestos no-estequiométricos. Mecanismos. Isotermas. Conductividad iónica y electrónica. Diagramas de Kroger-Vink. Interacción de defectos: Agregados, Microdominios y Fases Intermedias. Formación de no-estequiometría por defectos planares. Fases de Magneli

Tema 7.- Reacciones en fase in-homogénea. Leyes de Fick. Difusión intersticial. Coeficiente de Autodifusión. Interdifusión sustitucional en aleaciones. Potencial electroquímico y ley de Nerst-Einstein. Interdifusión en sólidos iónicos. Difusión térmica. Difusión en dislocaciones y límites de granos.

Tema 8.- Reacciones de oxidación de metales. Mecanismos de reacción. Oxidación controlada por la difusión y por la reacción interfacial. Efecto de la presión de oxígeno. Estudio particular del aluminio y el hierro. Nucleación y crecimiento. Formación de especies volátiles. Efecto de las relaciones epitaxiales y las tensiones mecánicas. Efecto del dopado y oxidación de aleaciones. Diferencias entre oxidación y corrosión

Tema 9.- Preparación de sólidos. Por reacción en estado sólido a alta temperatura. Extracción de metales. Por reacción en estado sólido a alta presión. Método de los precursores. Métodos de reacción a baja temperatura. Solidificación de fundidos. Cristalización de monocristales. Por precipitación y coprecipitación. Método hidrotermal. Métodos sol-gel. Métodos electroquímicos. Por sublimación. Transporte en fase vapor. Deposición química de vapor

Tema 10.- Algunas técnicas de caracterización de sólidos. (a) Difracción de Rayos X de Monocristal y de Policristal. Tamaño de cristal. (b) Microscopía Electrónica de Barrido. Imagen de electrones secundarios. Microanálisis por Rayos X. (c) Técnicas Espectroscópicas (XPS, XAS, IR). (d) Técnicas de Análisis Térmico. Termogravimetría. (e) Microscopía Electrónica de Alta Resolución. Difracción de Electrones. Descripción del Microscopio. Efecto del espesor y el desenfoque. Procesado y Simulación de Imágenes HREM.

Código Seguro de verificación:Wx0EfuGQPQ9MzYudXountA==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>  
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	1/4



Wx0EfuGQPQ9MzYudXountA==

**TEMARIO PRÁCTICO: QUÍMICA DEL ESTADO SÓLIDO**

Los créditos prácticos se repartirán de la siguiente manera:

- (a) Clases de problemas y ejercicios
- (b) Seminarios de temas relacionados con la asignatura
- (c) Clases prácticas de laboratorio:
  - a. Práctica I en el aula de informática: Estudio de las estructuras relacionadas con el empaquetamiento hexagonal compacto.
  - b. Práctica II en el aula de informática: Estudio de las estructuras relacionadas con los empaquetamientos cúbico compacto y cúbico simple.
  - c. Estudio del proceso de hidratación y carbonatación al aire de un óxido de lantano a través de diversas técnicas de caracterización de sólidos. Se dedicará especial atención a la Difracción de Rayos X.
  - d. Preparación y caracterización de un superconductor YBaCuO. Estudio por Microscopía Electrónica de Barrido y Microanálisis.
  - e. Práctica III en el aula de Informática: Interpretación de imágenes de Microscopía Electrónica de Alta Resolución. Aplicación a casos prácticos concretos.

Código Seguro de verificación:Wx0EfuGQPQ9MzYudXountA==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>  
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	2/4



**CRITERIOS DE EVALUACIÓN: QUÍMICA DEL ESTADO SÓLIDO**

La nota final de la asignatura será la suma de las calificaciones obtenidas a partir de:

- (a) Un examen final de la asignatura que incluirá preguntas cortas, preguntas de desarrollo y ejercicios (8 puntos).
- (b) Evaluación de la asistencia, participación y resultados obtenidos tanto de la clases teóricas como prácticas (2 puntos). Se necesita que la nota en el examen final supere un 4.

Código Seguro de verificación:Wx0EfuGQPQ9MzYudXountA==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>  
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	3/4



Wx0EfuGQPQ9MzYudXountA==

**BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL: QUÍMICA DEL ESTADO SÓLIDO**

- Solid State Chemistry and its Applications. A.R. West. John Wiley & Sons Ltd. (1985).
- Química del Estado Sólido. Hannay. Ed. Alhambra.
- Química del Estado Sólido. Smart y Moore. Addison-Wesley Iberoamericana (1995).
- Cristales iónicos, defectos reticulares y no estequiometría. N.N. Greenwood. Ed. Alhambra, S.A. (1970).
- Materials Concepts in Surface Reactivity and Catalysis. Henry Wise y Jacques Oudar. Academic Press, Inc. (1990).
- The Electronic Structure and Chemistry of Solids. P.A. Cox. Oxford University Press (1987).

**BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA: QUÍMICA DEL ESTADO SÓLIDO**

- Defects and Diffusion in Solids: An Introduction. Stanislaw Mrowec. Elsevier (1980).
  - Solid State Reactions. H. Schmalzried. Academic Press, Inc. (1974).
  - Treatise on Solid State Chemistry. Volume 4. Reactivity of Solids. Edited by N.B. Hannay. Plenum Press, (1976).
  - Chemical Kinetics of Solids. H. Schmalzried. VCH Publishers (1995).
  - Solid State Chemistry. Aaron Wold y Kirby Dwight. Chapman & Hall, Inc.
  - Inorganic Crystal Structures. Hyde and Andersson. John Wiley & Sons (1989).
  - Description Orbitale de la Structure Electronique des Solides. Iung et Canadell. Ediscience International, Paris (1997).
  - Chemical Bonding in Solids. J.K. Burdett. Oxford University Press (1995).
  - The CRC Handbook of Solid State Electrochemistry. Editado por P.J. Gellings y H.J.M. Bouwmeester. CRC Press (1997).
  - Bonding, Energy Levels & Bands in Inorganic Solids. J.A. Duffy. John Wiley and Sons, Inc. (1990).
- Nota: Además de las obras mencionadas, durante el desarrollo del Curso podrá hacerse referencia a otros textos, monografías o artículos, cuya lectura se considere recomendable.

Código Seguro de verificación:Wx0EfuGQPQ9MzYudXountA==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>  
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	4/4



Wx0EfuGQPQ9MzYudXountA==