

Complementos de química inorgánica y analítica

PROGRAMA

1. Estructura y Enlace Químico en Sistemas Moleculares: Elementos y operaciones de simetría puntual. Grupos de simetría puntual. Representaciones irreducibles. Tabla de caracteres. Orbitales adaptados por simetría (CLAS). Clasificación de los OM en grupos irreducibles para distintas geometrías. Aplicación: construcción de OM de compuestos de coordinación.

2. Niveles de energía y espectroscopía electrónica en Compuestos de Coordinación: Términos espectroscópicos, aproximaciones de campo fuerte y de campo débil: diagramas de Orgel y de Tanabe-Sugano. Reglas de selección. Tipos de transiciones: $d-d$, transferencia de carga, intervalencia; energía, intensidad y forma de las bandas en el espectro electrónico.

3. Estructura Cristalina de Sólidos: descripción y análisis: Modelos de empaquetamiento compacto para sólidos iónicos: aciertos, limitaciones y mejoras. Estructuras repetitivas: descripción en términos de Redes de Bravais con motivos. Celda unidad y primitiva. Estructuras complejas. Defectos: de Schottky, de Frenkel, compuestos no-estequiométricos. Red recíproca. Índices de Miller. Análisis estructural de sólidos por técnicas de difracción: Ley de Bragg. Ecuación de Laue. Factor de estructura. Ausencias sistemáticas. Difractómetros de RX: componentes, tipos, requisitos y posibilidades. Grado de cristalinidad y fórmula de Scherrer.

4. Estructura electrónica de Sólidos: Metales: el gas de electrones. El espacio k . Estado fundamental y energía de Fermi. Densidad de estados. Sólidos covalentes: el electrón sujeto a un potencial periódico. Funciones de Bloch. Aproximación por CLOA: construcción de funciones de Bloch en sistemas unidimensionales. Bandas. Características principales. Diagramas de dispersión, gráficos de densidad de estados, nivel de Fermi. Distorsión de Peierls. Extensión a sistemas bi- y tridimensionales. Diagramas de bandas de conductores, semiconductores y aislantes. Banda prohibida y nivel de Fermi.

5. Propiedades Eléctricas de los Sólidos: Portadores de carga. Bandas en semiconductores intrínsecos y dopados. Mecanismos de conducción eléctrica: por electrones, por huecos, por iones. Defectos. Conducción iónica y electrolitos sólidos. Efecto termoeléctrico. Materiales dieléctricos, paraeléctricos, ferroeléctricos, origen de la polarización y ciclos de histéresis. Propiedades eléctricas y estructura. Junturas.

6. Propiedades Ópticas de los Sólidos: Propiedades ópticas: dispersión y absorción. Reflectancia especular y reflectancia difusa. Espectros electrónicos de sólidos: origen del color, interpretación en términos de la estructura de bandas. Reglas de selección. Efecto del dopaje, la temperatura y presión sobre los espectros. Centros de color. Aplicaciones: LEDs, celdas fotovoltaicas, láseres de estado sólido, fibras ópticas, almacenamiento óptico de información.

7. Propiedades Magnéticas de los Sólidos: Susceptibilidad magnética y momento magnético efectivo; fundamentos y determinación experimental. Sistemas sin interacción: ley de Curie. Acoplamiento entre centros de spin: interacciones ferromagnéticas, antiferromagnéticas y ferrimagnéticas; mecanismos de intercambio directo y de superintercambio. Comportamientos magnéticos colectivos: ferromagnetismo, antiferromagnetismo, ferrimagnetismo. Ecuación de Curie-Weiss, temperatura de Néel y de Curie. Materiales con propiedades magnéticas: metales

paramagnéticos, metales ferromagnéticos, óxidos ferro- y ferrimagnéticos (espinelas). Ciclo de histéresis y aplicaciones al registro magnético, imanes permanentes, transformadores. Nuevos materiales magnéticos.

8. Síntesis y Caracterización de materiales: Métodos de síntesis de materiales. Métodos cerámicos, sol-gel, CVD, precursores, fusión por zonas, etc. Métodos de Caracterización de Materiales. Espectroscopias, RMN, Termogravimetría y análisis térmico diferencial, Técnicas de Rayos X: XAS, XANES, EXAFS, etc. Microscopías electrónicas (de Transmisión TEM, de Barrido (SEM), microscopía electrónica de efecto túnel (STM), microscopía de fuerza atómica (AFM). Difracción de electrones de baja energía (LEED), dispersión de neutrones (SANS). Principios físicos, resoluciones en energía, profundidad y lateral, posibilidades y limitaciones. Identificación de materiales, especiación química, discriminación entre muestras. Estudios de superficies. Espectroscopía fotoelectrónica X y UV (XPS, UPS). Espectroscopia Auger.

9. Seminarios sobre Materiales, dispositivos, transistores y sensores: Relación entre preparación del material, estructura y propiedades. Aplicación de las propiedades electrónicas, ópticas, magnéticas, etc. de los materiales en dispositivos: Láser, LED, grabación magnética, sensores lambda de combustión, diodos, capacitores, resistores, transistores, FET, MOS, etc.

BIBLIOGRAFIA

Básica

- Espectros Electrónicos de los Complejos de los Metales de Transición; D.Sutton; Ed. Reverté.
- Symmetry, Point Groups, and Character Tables, M. Orchin, H.H. Jaffé, Journal of Chemical Education, 47 (1979) 246-252 y 372-377 y 510-516.
- Solid State Physics; N.W. Ashcroft and N.D. Mermin. – Caps. 4, 5 y 6.
- Métodos Instrumentales de Análisis; H.H. Willar, L.L.Meritt, J.A. Dean and F.A. Settle.
- Solids and Surfaces. A chemist's view of bonding in extended Structures. Hoffmann, Roald. VCH.
- Teaching General Chemistry. A material Science Companion. Ellis, B. *et al.* American Chemical Society (1993).
- Smart, L. Moore, E. Química del estado sólido, Ed. Addison-Wesley
- Solid State Chemistry; D.West.

Complementaria

- The Electronic Structure and Chemistry of Solids; P.A.Cox.
- Introducción a la Física del Estado Sólido; C. Kittel.
- Apuntes elaborados por los docentes de la materia: Introducción, de estructura electrónica de sólidos, de propiedades eléctricas de sólidos, de propiedades magnéticas de sólidos, de propiedades ópticas de sólidos.

- Band Theory of Solids: An introduction from the point of view of symmetry, S.L. Altmann, (Oxford University Press), 1991.
- The Physics and Chemistry of Materials, J.I. Gersten, F.W. Smith, Wiley and Sons, 2001.