Ministerio de Cultura y Educación
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Química Bioquímica y Farmacia
Departamento: Quimica
Area: Qca General e Inorganica

(Programa del año 2023)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
ESTADO SÓLIDO	LIC. EN QUIMÍCA	3/11	2023	2° cuatrimestre

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
LOPEZ, CARLOS ALBERTO	Prof. Responsable	P.Adj Exc	40 Hs
BERNINI, MARIA CELESTE	Prof. Colaborador	P.Adj Exc	40 Hs
GOMEZ, GERMAN ERNESTO	Prof. Colaborador	P.Adj Exc	40 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
Hs	2 Hs	1 Hs	2 Hs	5 Hs

Tipificación	Periodo
B - Teoria con prácticas de aula y laboratorio	2º Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
07/08/2023	17/10/2023	15	80

IV - Fundamentación

La experiencia indica que el desempeño laboral actual, se encuentra fuertemente relacionado con el estado sólido y su problemática (cementeras, cerámicos, polímeros, procesos catalíticos, sólidos con propiedades ópticas y magnéticas específicas, tratamiento de metales, diseño y estudio de fármacos, etc.). Los conocimientos de Estado sólido son aplicados y requeridos en múltiples disciplinas y actividades profesionales tanto en el campo de la industria como en el académico. Se han identificado necesidades relacionadas con el conocimiento del Estado Sólido en egresados de carreras en las que no se cuenta con el abordaje de esta temática, como la Ingeniería Química, o Farmacia en la que la necesidad de adquirir criterios para el diseño, síntesis y caracterización de solidos se vuelve necesaria. El contenido de este curso contribuye a la Ciencia de Materiales y a la Cristalografia.

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

PROVEER los conocimientos y fundamentos del estado sólido.
INTRODUCIR los principios necesarios para: Comprender las técnicas de síntesis, caracterización y determinación de la estructura de sólidos. Entender las modificaciones de las propiedades originadas en los cambios estructurales de los sólidos. Incursionar en el análisis y selección de técnicas de diseño de materiales.
CAPACITAR para la aplicación de los distintos modelos y teorías asociadas al conocimiento global de sólidos en ciencia de materiales.
OFRECER al profesional interesado en la Química del Estado Sólido, los fundamentos, los métodos y software aplicados para una correcta identificación de sólidos y sus propiedades.

VI - Contenidos

Tema 1: Estructura de sólidos

a) Sólidos cristalinos. Naturaleza del enlace: sólidos iónicos, covalentes, moleculares, puente hidrógeno, metálicos, aleaciones y soluciones sólidas. Teoría de las bandas.

b) Clasificación según factores geométricos. Sistemas cristalinos. Simetría en cristales: Clases de simetría. Grupos puntuales. Grupos espaciales. Redes de Bravais.

c) Aplicaciones del modelo iónico al estudio de redes cristalinas. Desarrollo de redes típicas. Factores que afectan la estructura cristalina: estequiometría, estados de oxidación, número de coordinación, tamaños atómicos e iónicos.

Tema 2: Defectos reticulares

Imperfecciones en sólidos: Defectos reticulares. Defectos electrónicos. Defectos atómicos. Dislocaciones. Defectos en plano. Frontera de grano. Concentración de imperfecciones: cálculos. Imperfecciones y propiedades físicas (eléctricas, magnéticas, ópticas y mecánicas).

Tema 3: Sólidos de interés tecnológico

Metales, aleaciones, soluciones sólidas. Semi-conductores. Teoría de las bandas. Cerámicos. Sólidos Moleculares. Polimorfismo y transiciones de fase. Sólidos Porosos. Híbridos. Compositos. Amorfos o vítreos. Introducción al diseño de materiales.

Tema 4: Síntesis de sólidos.

Naturaleza de las reacciones del estado sólido. Nucleación y crecimiento cristalino: termodinámica y cinética. Estrategias preparativas: Condiciones generales. Métodos de síntesis de sólidos inorgánicos. Reacciones en estado sólido a altas temperaturas. Mecanosíntesis. Métodos de química suave o a bajas temperaturas.

Tema 5: Métodos de caracterización de sólidos.

Caracterización estructural. Difracción de Rx (convencional y sincrotón). Difracción de polvos y de monocristal. Difracción de neutrones: conceptos y aplicaciones generales. Método de Rietveld. Análisis térmico (ATD, ATG y DSC). Espectroscopía IR y Raman. Espectroscopía óptica. Espectroscopía Mösbauer. Caracterización de propiedades magnéticas. Caracterización de propiedades eléctricas: conductividad y permitividad. Espectroscopia de Impedancia. Caracterización textural: Conceptos básicos de Microscopía electrónica de barrido (SEM) y Microscopía de trasmisión (TEM).

Tema 6: Relación estructura – propiedades.

Influencia de la estructura cristalina sobre las propiedades eléctricas (efecto piezoeléctrico y ferroeléctrico), magnéticas (ferro-, ferri- antiferro- y paramagnetismo), ópticas, térmicas y catalíticas. Nano materiales. Relación tamaño de partículas-propiedades. Conceptos básicos de la obtención de nanomateriales y films delgados.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

TRABAJOS PRACTICOS DE AULA

Para cada módulo se prevén trabajos prácticos de resolución de problemas y cálculos.

1.- Simetría molecular (4 h)

2.- Simetría en Cristales (4 h)

3.- Defectos Reticulares (3 h)

4.- Aplicación de DRX de monocristal y de polvos a la dilucidación estructural. Ajustes por método de Rietveld. Difracción de neutrones. (4 h)

TRABAJOS PRACTICOS DE LABORATORIO

Las prácticas de laboratorio son no estructuradas. Cada cursada el estudiante elige entre una serie de opciones de síntesis de materiales con diferentes aplicaciones tecnológicas.

1) Síntesis de un nuevo compuesto sólido (10 h)

2) Utilización de instrumental para su caracterización: DRX, FTIR, Análisis térmico, entre otras disponibles. (18 h)

3) Observación de las muestras obtenidas en microscopio electrónico del LABMEM y clase de introducción a esta técnica. (2 h)

4) Análisis e interpretación de resultados, elaboración de un informe y prestación final (de forma oral) de los resultados obtenidos.

NORMAS GENERALES DE SEGURIDAD
Condiciones de trabajo: Prevención. Normas de seguridad. Cuidado y limpieza del lugar de trabajo. Señalizaciones. Código de colores.
Hábitos de trabajo: Ubicación del material de seguridad como extintores, duchas de seguridad, lavaojos, botiquín, etc. Etiquetas y fichas de datos de seguridad de los productos. Campanas.
Protección personal: Normas básicas. Criterio y grados de protección. Elementos de protección personal. Guantes de seguridad. Guardapolvos. Gafas de seguridad.
Seguridad en el laboratorio: Seguridad en la manipulación de materiales y/o sustancias. Derrames. Tratamiento de polvos, gases y humos. Tratamiento de residuos.

VIII - Regimen de Aprobación

El Curso está estructurado en clases Teóricas y en Trabajos Prácticos de Aula y de Laboratorio.

El alumno deberá:
a. Asistir al 80% de las clases teóricas.
b. Asistir al 80% de las clases de aula.
c. Aprobar el 100% de los parciales.
d. Aprobar las actividades Prácticas de Laboratorio. (Aprobación de un Informe Final de Trabajo de Síntesis y Caracterización del Material Obtenido)

Se accede a la condición de REGULAR con la aprobación de dos parciales y del Informe final de Trabajo experimental.

La condición de APROBADO se alcanza por PROMOCION, mediante la aprobación de un examen integrador, al final de la cursada, o bien rindiendo un Examen Final en las mesas habilitadas.

IX - Bibliografía Básica

[1] “Solid State Chemistry: Techniques” A.K.Cheetham, P. Day. Oxford Science Publications. Oxford University Press, 1987
[2] “Cristales iónicos, defectos reticulares y no estequiometría.” N. N. Greenwood. Ed. Alhambra-Madrid, 1970
[3] “Solid State Chemistry. An Introduction” Lesley E.Smart, Elaine A. Moore. Tercera Edicion 2005 by Taylor & Francis Group, LLC
[4] “Crystal Structure Determination”, W. Clegg. Oxford Science Publications. Oxford University Press, 1998.
[5] “Fundamentals of crystallography” C. Giacovazzo, H. L. Monaco, D. Viterbo, F. Scordari, G. Gilli, G. Zanotti, M. Catti. IUCr. Oxford Science Pubs. 1995.
[6] “Química Inorgánica”, C. E. Housecroft, A.G. Sharpe, Pearson Prentice Hall. Pearson Educación S.A., Madrid, 2006.
[7] “New Directions in Solid State Chemistry” C.N.R.Rao, J. Gopalakrishnan Cambridge University Press, 1997.
[8] “Solid State Chemistry and its applications” A.R. West, 2nd Ed. John Wiley and Sons, London, 2014.

X - Bibliografia Complementaria

[1] “Spectroscopic Methods in Mineralogy and Geology” F. C. Hawthorne. Paul H. Ribbe Ed. Department of Geological Sciences, Mineralogical Society of America, Virginia, USA, 1988.
[2] “Introducción a la teoría de grupos para químicos” G. Davidson. Ed. Reverté, España, 1979.
[3] Tesis doctorales desarrolladas en el grupo de Química Inorgánica.
[4] Papers y Reviews de difusión internacional.
[5] Páginas Web: The Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC). www.ccdc.cam.ac.uk
[6] Departamento de Cristalografía y Biología Estructural del Instituto de Química-Física Rocasolano, CSIC. España http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/index.html

XI - Resumen de Objetivos

Proveer al estudiante los conocimientos y fundamentos del estado sólido, mediante la comprensión de las técnicas de síntesis, caracterización y determinación de la estructura de sólidos y las modificaciones de las propiedades originadas en los cambios estructurales. Generar en el estudiante, en esta etapa de su carrera, la capacidad de entender las aplicaciones de los distintos modelos y teorías en el conocimiento global de sólidos en ciencia de materiales.

XII - Resumen del Programa

Estructura de sólidos. Sólidos cristalinos. Clasificación. Teorías. Factores que afectan la estructura cristalina. Defectos reticulares. Imperfecciones en cristales. Relación de estas imperfecciones con las propiedades. Métodos de caracterización de sólidos. Diferentes métodos de caracterización estructural. Solidos de interés tecnológico. Crecimiento cristalino. Relación entre la estructura cristalina, tamaño de partícula y las propiedades físicas.

XIII - Imprevistos

Las 5 horas que no están contempladas en las actividades de teoría, prácticos de aula y laboratorio serán destinadas a consultas para la elaboración de Informe Final.

XIV - Otros