

Titulació	Tipus	Curs
Química	OT	4

Professor/a de contacte

Nom: Ramón Yáñez López

Correu electrònic: ramon.yanez@uab.cat

Equip docent

Ramón Yáñez López

Idiomes dels grups

Podeu consultar aquesta informació al [final](#) del document.

Prerequisits

Prerequisits

Haver cursat i superat l'assignatura Ciència dels Materials de 3er curs.

Objectius

La assignatura "Química del Estat Sòlid" té com a objectiu ampliar els coneixements assolits amb l'assignatura obligatòria de tercer curs Ciència de Materials introduint conceptes molt significatius com són els mètodes de preparació de materials i les propietats físiques dels materials. Així, a l'inici es descriuran els aspectes bàsics de l'enllaç en els sòlids (teoria de bandes), es continuarà amb l'estudi de les propietats elèctriques, magnètiques i òptiques dels materials tot relacionant aquestes propietats amb les seves característiques estructurals i finalment es descriuran els aspectes bàsics dels mètodes de síntesi de sòlids.

Competències

- Adaptar-se a noves situacions.
- Aprendre de manera autònoma.

- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
- Demostrar motivació per la qualitat.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, els principis, les teories i els fets fonamentals de les diferents àrees de la química.
- Emprar correctament la llengua anglesa en l'àmbit de la química.
- Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Mantenir un compromís ètic.
- Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
- Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
- Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Resultats d'aprenentatge

1. Adaptar-se a noves situacions.
2. Aprendre de manera autònoma.
3. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
4. Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
5. Demostrar motivació per la qualitat.
6. Descriure les propietats òptiques dels materials i les aplicacions més importants.
7. Diferenciar entre els diversos tipus de conductors elèctrics sòlids i relacionar-los amb la seva estructura, enllaç i aplicacions més importants.
8. Distingir els models d'enllaç químic en els sòlids i relacionar-los amb les propietats fisicoquímiques d'aquests.
9. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
10. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
11. Interpretar el comportament magnètic dels materials en funció de la seva estructura i enllaç, i relacionar-lo amb les seves aplicacions més importants.
12. Llegir, analitzar i extreure informació de textos en llengua anglesa sobre els diversos àmbits del camp de la química de materials.
13. Mantenir un compromís ètic.
14. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
15. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
16. Proposar idees i solucions creatives.
17. Raonar de forma crítica.
18. Resoldre problemes i prendre decisions.
19. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
20. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

Continguts

Química de l'Estat Sòlid

6 ECTS: 31 horas de teoria + 10 hores d'exercicis

1. Enllaç químic i valència

- Teoria de Hückel d'òrbits moleculars i SALC
- Model de valència d'enllaç.
- Distorsió Jahn-Teller de primer i segon ordre.

- Valencia d'enllaç

2. Estructura de bandes electròniques

- L'estructura de bandes d'una cadena d'àtoms d'hidrogen
 - Les estructures electròniques de les molècules cícliques H
 - Simetria translacional i la funció de Bloch
 - El nombre quàntic k
 - Visualització dels orbitals cristal·lins
 - Diagrames d'estructura de bandes
 - Gràfiques de densitat d'estats (DOS)
 - L'estructura de bandes d'una cadena de molècules H₂
 - Propietats elèctriques i òptiques
 - Metalls, semiconductors i aïllants
 - Semiconductors de gap directe versus indirecte
- Representació de les estructures de bandes en dimensions superiors
 - Orbitals cristal·lins en dues dimensions
 - Orbitals cristal·lins en tres dimensions
- Estructures de bandes de materials bidimensionals
 - Grafè
 - Xarxa quadrada de CuO₂²⁻
- Estructures de bandes de materials tridimensionals
 - α -Poloni
 - Diamant
 - Semiconductors elementals
 - Triòxid de reni
 - Perovskites

3. Materials òptics

- Llum, color i excitacions electròniques
- Pigments, colorants i gemmes
- Transicions entre orbitals d (excitacions $d-d$)
 - Teoria del camp de lligands i del camp cristal·lí
 - Espectres d'absorció i termes espectroscòpics
 - Diagrames de correlació
 - Regles de selecció i intensitat d'absorció
 - Excitacions de transferència de càrrega
 - Transferència de càrrega lligand-a-metall
 - Transferència de càrrega metall-a-metall
- Semiconductors compostos
 - Absorbància òptica, amplitud de banda i color
 - Electronegativitat, solapament orbital i amplitud de banda
- Molècules orgàniques conjugades
- Luminescència
- Fotoluminescència
 - Components d'un fòsfor
 - Retorn radiatiu a l'estat fonamental
 - Extinció tèrmica
 - Activadors lantanoides
 - Activadors no lantanoides
 - Transferència d'energia
 - Sensibilitzadors
 - Extinció per concentració i relaxació creuada
 - Fotoluminescència per conversió ascendent
- Electroluminescència
 - Díodes emissors de llum inorgànics (LEDs)
 - Díodes emissors de llum orgànics (OLEDs)
- Materials per a il·luminació

- Fòsfors per a làmpades fluorescents
- LEDs convertits amb fòsfors per a llum blanca

4. Materials dielèctrics i òptics no lineals

- Propietats dielèctriques
 - Permittivitat i susceptibilitat dielèctrica
 - Polarització i equació de Clausius-Mossotti
 - Mecanismes microscòpics de polaritzabilitat
 - Dependència en freqüència de la resposta dielèctrica
 - Pèrdues dielèctriques
 - Polaritzabilitats dielèctriques i regla d'additivitat
 - Simetria cristal·logràfica i propietats dielèctriques
 - Piroelectricitat i ferroelectricitat
 - Ferroelectricitat en BaTiO_3
 - Antiferroelectricitat
 - Piezoelectricitat
 - Consideracions d'enllaç local en materials no centrosimètrics
 - Distorsions Jahn-Teller de segon ordre amb cations d^0
 - Distorsions Jahn-Teller de segon ordre amb cations s^2p^0
- Materials òptics no lineals
- Susceptibilitat no lineal i concordança de fase
- Materials destacats per a generació de segon harmònic (SHG)
 - KH_2PO_4
 - KTiOPO_4
 - Niobats i tantalats
 - Materials NLO orgànics i polimèrics
 - Borats

5. Materials magnètics

- Materials magnètics i aplicacions
- Física del magnetisme
 - Imants de barra i imants atòmics
 - Intensitat, inducció, energia, susceptibilitat i permeabilitat magnètiques
 - Sistemes d'unitats en magnetisme
 - Tipus de materials magnètics
 - Orígens atòmics del magnetisme
 - Moviments electrònics que contribueixen al magnetisme i la seva quantització
 - Moments magnètics atòmics
 - Moments magnètics dels ions 3d en compostos
 - Moments magnètics dels ions 4f en compostos
 - Nota sobre moments magnètics dels metalls 4d i 5d en compostos
 - Diamagnetisme
 - Paramagnetisme
 - Paramagnetisme de Curie i Curie-Weiss
 - Paramagnetisme de Pauli
 - Antiferromagnetisme
 - Interaccions de superintercanvi
 - Ferromagnetisme
 - Aïllants ferromagnètics i "half-metals"
 - Metalls ferromagnètics
 - Superferromagnets
 - Ferrimagnetisme
 - Sistemes frustrats i vidres d'espín
 - Multiferroics magnetoelèctrics
 - Imants moleculars i orgànics

6. Materials conductors

- Metalls
 - Model de Drude
 - Model d'electrons lliures
 - Distribució de Fermi-Dirac
 - Concentració de portadors
 - Mobilitat de portadors i massa efectiva
 - Velocitat de Fermi
 - Mecanismes de dispersió
 - Estructura de bandes i conductivitat de l'alumini
 - Estructures de bandes i conductivitat dels metalls de transició
 - Semiconductors
 - Concentració de portadors en semiconductors intrínsecs
 - Dopatge
 - Concentració de portadors i energies de Fermi en semiconductors dopats
 - Conductivitat
 - Unions $p-n$
 - Díodes emissors de llum i cel·les fotovoltaïques
 - Transistors
 - Compostos de metalls de transició
 - Repulsió electrònica: model de Hubbard
 - Compostos amb estructura tipus NaCl
 - Compostos amb estructura perovskita
 - Conductors orgànics
 - Polímers conductors
 - Hidrocarburs aromàtics policíclics
 - Sals de transferència de càrrega
 - Carboni
 - Grafè
 - Nanotubs de carboni

7. Superconductivitat

- Panorama de la superconductivitat
- Propietats dels superconductors
- Orígens de la superconductivitat i teoria BCS
- Superconductors derivats de C_{60}
- Superconductors moleculars
- Superconductors perovskites $BaBiO_3$
- Superconductors cuprats
 - Materials La_2CuO_4
 - Materials $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ «YBCO» o «123»
 - Altres cuprats
 - Propietats electròniques dels cuprats
 - Prictids de ferro i superconductors relacionats

8. Materials energètics: conductors iònics, conductors mixts i química d'intercalació

- Cel·les electroquímiques i bateries
- Cel·les de combustible
- Conductivitat en compostos iònics
- Conductors superiònics
 - AgI: conductor superiònic catiònic
 - PbF_2 : conductor superiònic aniònic
 - Conductors catiònics
 - Beta-alúmina de sodi
 - Altres conductors catiònics ceràmics
 - Conductors catiònics polimèrics
 - Conductors protònics
 - Conductors protònics que contenen aigua

- Sals àcides
- Conductors protònics de perovskita
- Conductors d'ió òxid
 - Conductors d'ió òxid de tipus fluorita
 - Perovskita i altres conductors d'òxid
 - Materials d'elèctrode per a SOFC i conductors mixts
- Química d'intercalació i aplicacions
 - Química d'intercalació al grafit
 - Química d'intercalació de liti i elèctrodes de bateria
 - Bateries d'ió-liti amb càtodes d'òxid
 - Característiques electroquímiques de les bateries de liti
 - Altres materials d'elèctrode per a bateries de liti

Activitats formatives i Metodologia

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes teòriques	40	1,6	1, 2, 6, 7, 8, 11
Tipus: Supervisades			
Tutoria	6	0,24	1, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20
Tipus: Autònomes			
Estudi	65	2,6	1, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20
Lectura de textos	13	0,52	1, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20
Preparació de treballs sobre la matèria	18	0,72	1, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20

L'assignatura s'imparteix en forma de classes de teoria i de pràctiques d'aula.

1) Classes teòriques.

Mitjançant les exposicions del professor/a l'alumne ha d'adquirir els coneixements propis d'aquesta assignatura i complementar-los amb l'estudi de cada tema tractat amb l'ajut del material que el professor proporcioni a través del Campus Virtual i la bibliografia recomanada. Les classes teòriques seran obertes a la participació dels alumnes, que podran plantejar al professor les qüestions i aclariments que considerin necessaris. El professor pot assignar exercicis o qüestions específiques als alumnes per a que els resolguin (a casa o a l'aula) i es discuteixin a l'aula. També en aquestes classes es faran les presentacions dels treballs bibliogràfics dels alumnes on s'incentivarà la participació de tots els alumnes en les preguntes i discussions relatives als treballs.

2) Treball personal

Els alumnes hauran de resoldre obligatòriament algun treball, problemes, evidències i/o busqueda bibliogràfica sobre temes proposats pel professor

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, perquè els alumnes completin les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura.

Avaluació

Activitats d'avaluació continuada

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Exàmens escrits	75%	4	0,16	1, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 11, 13, 14, 16, 17
Proves de seguiment	25%	4	0,16	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20

Exàmens

A efectes d'avaluació, l'assignatura es troba dividida en dues parts.

Al llarg del semestre es realitzaran dos exàmens parcials, un de cada part (ExP1 i ExP2), i un examen global de recuperació (ExG), tots ells amb una nota entre 0 i 10.

Treball de seguiment

Al llarg del semestre es recolliran un cert nombre de proves del seguiment de l'alumnat (problemes resolts individualment o en grup, proves curtes d'aula, preguntes a classe, etc). L'alumnat obtindrà, per tant, dues notes de seguiment (S1 i S2), que seran les mitjanes ponderades de les qualificacions obtingudes en les proves de seguiment de cada part de l'assignatura.

Qualificacions:

Cada part de l'assignatura tindrà una qualificació (Not1 i Not2) que serà:

$$\text{Not1} = 0,75 \times \text{ExP1} + 0,25 \times \text{S1}$$

$$\text{Not2} = 0,75 \times \text{ExP2} + 0,25 \times \text{S2}$$

La nota final (NF) s'obtindrà de la manera següent:

$$\text{NF} = (\text{Not1} + \text{Not2})/2$$

Per superar l'assignatura per parcials s'han de complir les dues condicions següents:

- 1) La nota final de l'assignatura (NF) ha de ser $\geq 5,0$
- 2) Per a poder fer mitjana, ExP1 i ExP2 han de ser $\geq 4,5$

En cas de que no es compleixi el requisit anterior, l'estudiant s'haurà de presentar a l'examen de recuperació, on podrà recuperar un o els dos parcials, donat que les matèries de cada parcial estaran separades i identificades com tals (NotR1 i NotR2). La NFR es calcularà reemplaçant els valors de ExP1 i/o ExP2 pels obtinguts a l'examen de recuperació ExR1 i/o ExR2.

Per a participar a la recuperació l'alumnat ha d'haver estat prèviament avaluat en un conjunt d'activitats el pes de les quals equivalgui a un mínim de dues terceres parts de la qualificació total de l'assignatura.

Per a superar l'assignatura a l'examen de recuperació s'han de complir les dues condicions següents:

- 1) La nota final de l'assignatura (NFR) ha de ser $\geq 5,0$
- 2) Per a poder fer mitjana, ExR1 i ExR2 han de ser $\geq 4,5$

La nota final a l'examen global es calcula:

$$\text{NFR} = (\text{NotR1} + \text{NotR2})/2$$

$$\text{NotR1} = 0,75 \times \text{ExR1} + 0,25 \times \text{S1}$$

$$\text{NotR2} = 0,75 \times \text{ExR2} + 0,25 \times \text{S2}$$

L'alumnat que no superi l'assignatura perquè no superi algun dels blocs, independentment de quina sigui la seva mitjana global, obtindrà una nota final màxima de 4,5.

Els alumnes que superin el curs per parcials però vulguin millorar la seva qualificació, podran presentar a l'examen global però hauran de fer-lo complet; es a dir, les dues subproves corresponents a cada parcial. La nota de l'examen de recuperació substituirà la nota que es pogués tenir del conjunts dels dos parcials i, per tant, tindrà un pes del 85% (la nota dels treballs de seguiment no es podrà recuperar). A l'examen global, l'estudiant no optarà a la qualificació de Matrícula d'Honor.

Les notes finals dels alumnes aprovats es podran normalitzar de 0 a 10 (la nota màxima ha de ser 10, tot respectant l'ordre, i es podrà incrementar fins a 1.5 punts la nota) a fi i efecte d'assolir la distribució entre aprovats, notables, excel·lents i MHs que els professors considerin idònia.

Si l'alumne només ha estat avaluat com a màxim d'un 33% de les proves i abandona, la qualificació final serà de NO AVALUABLE.

Avaluació única:

L'alumnat que s'hagi acollit a la modalitat d'avaluació única haurà de realitzar una prova final que consistirà en un examen de tot el temari de l'assignatura a realitzar el dia en què els estudiants de l'avaluació continua fan l'examen del segon parcial. La qualificació de l'estudiant serà la nota d'aquesta prova.

Si la nota final no arriba a 5, l'estudiant té una altra oportunitat de superar l'assignatura mitjançant l'examen de recuperació que se celebrarà en la data que fixi la coordinació de la titulació. La qualificació de l'estudiant serà la nota d'aquesta prova.

S'aplicarà el mateix criteri de no avaluable que per l'avaluació continuada.

Els alumnes hauran d'actuar de forma honesta al llarg del curs. Les actituds deshonestes (copiar, deixar copiar o tota acció encaminada a distorsionar una avaluació) en qualsevol prova de seguiment o examen seran motiu d'una qualificació de "Suspès" amb una nota final de 0 en l'assignatura, independentment de la resta de notes obtingudes per l'alumne. En particular, durant les provesescrites, els telèfons mòbils o qualsevol altre aparell de telecomunicació han d'estar desconnectats i guardats a les bosses o motxilles que hauran d'estar sobre la tarima. En cas que es detecti que un alumne porta algun dispositiu no autoritzat a sobre durant l'examen i/o prova de seguiment, l'alumne serà expulsat de l'aula i tindrà una qualificació de "Suspès" a l'assignatura.

Bibliografia

R. J. D. Tilley "Understanding Solids" 2013, JohnWiley & Sons Ltd

P. M. Woodward, P. Karen, J. S. O. Evans and T. Vogt "Solid State Materials Chemistry", 2021, Cambridge University Press

W.D. Callister "Introducción a la Ciencia e Ingeniería de Materiales" Reverté

D. R. Askeland "Ciencia e Ingeniería de Materiales" Paraninfo

A. R. West; Basic Solid State Chemistry; "Solid State Chemistry and its Applications" (Second edition) Wiley&Sons ISBN: 978-1-119-94294-8

L. E. Smart, E. A. Moore; "Solid State Chemistry: An Introduction" (Fourth Edition); CRC Press; ISBN-10: 1439847908

Programari

Cap

Grups i idiomes de l'assignatura

La informació proporcionada és provisional fins al 30 de novembre de 2025. A partir d'aquesta data, podreu consultar l'idioma de cada grup a través daquest [enllaç](#). Per accedir a la informació, caldrà introduir el CODI de l'assignatura

Nom	Grup	Idioma	Semestre	Torn
(TE) Teoria	1	Català	segon quadrimestre	matí-mixt