

## Resumen

El estudio de la materia sometida a condiciones extremas de presión y/o temperatura nos permite ampliar nuestros conocimientos sobre sus propiedades estructurales, elásticas, vibracionales, ópticas, eléctricas y magnéticas; comprender y predecir su comportamiento frente a estas condiciones; y valorar su aplicabilidad en ámbitos tan dispares como la computación cuántica, los semiconductores, la ciencia de materiales, la medicina o la farmacología.

La presión es una variable termodinámica relativamente rápida y fácil de modificar que nos permite avanzar en la comprensión del comportamiento de la materia en función de las múltiples propiedades que la definen. Cuando las propiedades de un material no estable en condiciones ambientales mejoran bajo presión, y se prevé que su utilización pueda desarrollar aplicaciones novedosas o mejorar las ya existentes, se puede estudiar la posibilidad de sintetizar este nuevo material a presión ambiente aprovechándonos de las barreras cinéticas entre las transiciones de fase.

El desarrollo tecnológico de las técnicas de caracterización de las propiedades de los materiales, así como de los modelos teóricos que permiten realizar cálculos *ab initio*, junto con la aplicación de altas presiones, han facilitado la consecución de los objetivos de análisis y comprensión de las propiedades estructurales, mecánicas, electrónicas y vibracionales de los compuestos de tipo  $As_2X_3$  (sesquióxidos y sesquicalcogenuros de arsénico) de esta tesis doctoral.

Con este fin se recoge en la presente tesis el compendio de los trabajos realizados en varios compuestos de tipo  $As_2X_3$ , en concreto los compuestos estudiados han sido la arsenolita pura ( $As_4O_6$ ), el compuesto resultante al medir la arsenolita con He como medio transmisor de presión (MTP) a altas presiones ( $As_4O_6 \cdot 2He$ ), el oropimente ( $\alpha-As_2S_3$ ) y el telururo de arsénico ( $\alpha-As_2Te_3$ ).

El análisis y la comprensión de las propiedades de estos compuestos ha supuesto un avance en el estudio de los sesquióxidos y sesquicalcogenuros del grupo 15, y allana el camino para diseñar nuevos sesquicalcogenuros del grupo 15 y compuestos relacionados con propiedades termoeléctricas o aislantes topológicas, tanto a presión ambiente como en condiciones extremas.