
CRISTALOGRAFÍA

Curso: Electivo

Coordinador: Dr. Víctor Manríquez

Colaborador: Dr. Antonio Galdámez

Nivel: Magister y Doctorado

Semestre y año: primavera 2018

Descripción

Curso electivo especializado en el área de Físicoquímica del estado sólido dirigido a estudiantes de postgrado del área científica. Este curso tiene énfasis en la simetría y en la resolución de estructuras cristalinas mediante la técnica de Difracción de rayos X en monocristal. Además, este curso considera actividades teóricas y prácticas; como es la resolución estructural y análisis de los datos cristalográficos mediante programas avanzados de cristalografía.

Objetivo

El objetivo es que los alumnos(as) adquieran conocimientos de simetría cristalina y fundamentos físicos de la Difracción de rayos X, que les permita interpretar y analizar las propiedades estructurales que presentan distintos sólidos extendidos.

Prerrequisitos: No aplica

Contenidos

1.-LA DIFRACCIÓN DE RAYOS X EN CRISTALES

Generación de Rayos X

El espectro continuo

Planos Reticulares, Índices de Miller

Morfología Cristalina

2.-SIMETRÍA CRISTALINA

Clases de cristales y sistemas de coordenadas

Elementos de Simetría

Los Sistemas Cristalinos y redes de Bravais

Grupos Puntuales y Grupos Espaciales

3.-RESULTADOS FUNDAMENTALES DE LA TEORÍA DE LA DIFRACCIÓN

Transformada de Fourier y operaciones de convolución

Ley de Friedel

Densidad electrónica y funciones relacionadas

Principales resultados de la teoría de difracción

Condiciones de difracción en monocristales

Condición de difracción de Ewald

Ley de Bragg

4.-MÉTODOS DE DIFRACCIÓN DE RAYOS X

Simetría Cristalina y de las intensidades

Representación de la densidad electrónica y de los factores de estructura

Grupos de LAUE

5.-DETERMINACIÓN DE UN MODELO DE ESTRUCTURA CRISTALINA

Extinciones sistemáticas

Problema de la Fase

6.-REFINAMIENTO DE UN MODELO DE ESTRUCTURA CRISTALINA

Descripción de Estadígrafos de refinamiento

Archivo CIF (Crystallographic Information File) y utilización de los programas (mercury, EnCifer)

Bases de datos

IUCr

7.-PRÁCTICO

Resolución estructural mediante programas

Análisis cristalográfico (PLATON)

Visita al equipo de difracción de monocristales de la Universidad

Evaluación y metodología

El curso se desarrollara con clases expositivas (2 h por semana), trabajo personal en una tarea escrita y un trabajo práctico individual de resolución estructural y análisis cristalográfico.

Total horas semanales (directas e indirectas): 4 horas

La nota Final del curso es el promedio de la tarea y el trabajo práctico de resolución estructural.

Bibliografía

- Jenny Pickworth and Kenneth Trueblood, **“Crystal Structure Analysis”**, *Third edition, Oxford Press-IUCR, 2010*
- Michael Woolfson, **“Direct Methods in Crystallography”**, *Oxford University Press, 1971*
- Peter Luger, **“Modern X-Ray analysis on single crystals, A Practical Guide”**, *second edition, The Gruyter, 2014*
- Ulrich Müller, **“Inorganic Structural Chemistry”**, *second edition, John Wiley and Sons, 2007*
- Donald E. Sands, **“Introducción a la Cristalografía”**, *Reverté, 1993*
- Peter Müller, **“Crystal Structure Refinement A Crystallographer’s Guide to SHELXL”**, *Oxford Press-IUCR, 2006*
- Erich R. Wolfel, **“Theory of the crystal structure analysis by diffraction methods”**