

QUÍMICA ESTRUCTURAL

Curso: Electivo

Nivel: Postgrado (Magíster y Doctorado)

Coordinador: Dr. Antonio Galdámez (UChile) **Semestre y año:** primavera 2022

Colaboradoras: Dra. Silvana Moris (UCM), Dra. Paulina Valencia-Gálvez (UChile) y Dra. Catalina Cortés (UChile)

Cupos y requisitos: Conocimientos de Química Inorgánica y termodinámica básica. 15 cupos postgrado y 5 cupos para pregrado.

Código: CS07DQ0111

Descripción

Curso electivo especializado en el área de Química del Estado Sólido y Cristalografía dirigido a estudiantes de postgrado del área científica. Este curso tiene énfasis en la interpretación de propiedades fisicoquímicas a partir de la estructura cristalina y de las fuerzas intra e intermoleculares en sólidos extendidos. Además, tiene por objetivo introducir a las descripciones topológicas de las estructuras cristalinas. Este curso considera actividades teóricas y prácticas; como son tareas, seminario y la utilización de programas de cristalografía.

Objetivo

El objetivo es que los alumnos(as) adquieran conocimientos de química del estado sólido y cristalografía que les permita interpretar las propiedades fisicoquímicas que presentan distintos sistemas extendidos. Además, introducir a las siguientes técnicas de caracterización: Difracción de rayos X, Microscopía electrónica y Análisis térmico.

Contenidos y saberes

1. Difracción de rayos X y cristalografía
 - 1.1 Cristal, celda unitaria, redes de Bravais
 - 1.2 Densidad cristalina y fórmula química
 - 1.3 Simetría, grupos espaciales e intensidades de difracción
 - 1.4 Técnicas en monocristales y polvo policristalino
 - 1.5 Bases de datos y archivo CIF
2. Poliedros de coordinación y relaciones estructurales
 - 2.1 Empaquetamientos compactos y estructuras tipo
 - 2.2 Defectos cristalinos y No-estequiometría
 - 2.3 Microscopía electrónica SEM/TEM
 - 2.4 Sólidos covalentes y moleculares
 - 2.5 Puentes de hidrógeno y contactos intermoleculares
 - 2.6 Topología: Introducción a la representación de estructuras cristalinas

3. Diagramas de Fase

- 3.1 Sistemas binarios y ternarios
- 3.2 Transiciones de fase, relaciones estructurales grupo-subgrupo
- 3.3 Análisis térmico (TG/DTA/DSC)

4. Relación entre estructura y propiedades físicas

- 4.1 Minerales y Silicatos: estructura y propiedades fisicoquímicas
- 4.2 Espinelas inversas: ferrimagnetismo
- 4.3 Haluros alcalinos: Conductores iónicos
- 4.4 Silicio y sus aplicaciones: Semiconductores
- 4.5 BaTiO₃: Ferroelectricidad
- 4.6 PbTe y disoluciones sólidas: Efecto termoeléctrico

5. Uso de programas de cristalografía y actividades prácticas

- 5.1 Archivos CIF y visualización de estructuras: Mercury y enCIFer (IUCr)
- 5.2 Indexación y visualización de difractogramas de polvo PXR: CHEKCELL y PowderX
- 5.3 Metodología Rietveld: MAUD y FullProf suite
- 5.4 Resolución Cristalina: Olex2 crystallographic program
- 5.5 Reconocimiento y clasificación de minerales
- 5.6 Visita a equipos de Difracción de rayos X

Evaluación y metodología

- El curso se desarrollará con clases expositivas, trabajo guiado en programas, trabajo personal en tareas y presentación de un seminario.
- Clases expositivas/discusión (1,5 h semanales-Viernes 10:15 h).
- Trabajo asistido/guiado con programas de Cristalografía (1,5 h semanales-miércoles 16:15 h)
- Trabajo personal: 9,0 h semanales.
- La nota Final del curso es el promedio simple de tareas y un seminario.

Bibliografía

- R. West, Solid State Chemistry and It's applications, second edition (student edition), John Wiley and Sons (2014)
- Ulrich Müller, Inorganic Structural Chemistry, second edition, John Wiley and Sons (2007)
- Carlos Pico m, M luisa López G y M luisa Veiga B, Cristaloquímica de Materiales. De la estructura a las propiedades de los sólidos inorgánicos, primera edición, Editorial síntesis S.A. (2007)

- L.E. Smart and E. A. Moore, Solid State Chemistry and Introductions, Third edition, Taylor and Francis group (2005)
- Ángel Vega Molina, Modelos estructurales de Cristales Inorgánicos: De los elementos a los compuestos, primera edición, Servicio de Publicaciones e Imagen Institucional Universidad de Burgos – España (2021)
- Artículos Científicos seleccionados del área.

Recursos Web

Para temáticas relacionadas con el curso es recomendable consultar las siguientes direcciones web:

- International Union of Crystallography. <https://www.iucr.org/>
- The Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC). <https://www.ccdc.cam.ac.uk/>
- The Materials Project. <https://materialsproject.org/>
- The RRUFF Project website containing an integrated database of Raman spectra, X-ray diffraction and chemistry data for minerals. <https://rruff.info/>
- American Mineralogist Crystal Structure Database. <http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php>

Página que incluye enlaces a Software de cristalografía gratuitos:

Indexación y visualización

- enCIFer and Mercury CIF software's for checking, editing and crystal structure visualization from the CCDC, <https://www.iucr.org/resources/cif>
- PowDLL software, <http://users.uoi.gr/nkourkou/powdll/>
- PowderX program for powder X-ray diffraction data processing, <https://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?gl0600>
- Chekcell program, <https://www.iucr.org/resources/other-directories/software/chekcell>

Metodología Rietveld y resolución Cristalina

- FullProf suite, <https://www.ill.eu/sites/fullprof/>
- Material Analysis Using Diffraction MAUD, <http://maud.radiographema.eu/>
- Olex2 crystallographic program, <https://www.olexsys.org/olex2/>

Calendario tentativo de Actividades

Tópicos	Número de clases Semanas/días
Cierre de ACTAS	

