



FACULTAD DE CIENCIAS

## CURSO DE POSTGRADO

<b>Nombre del curso</b>	Química Estructural
<b>Tipo de curso</b> (Obligatorio, Electivo, Seminario)	Electivo
<b>Nº de horas totales</b> (Presenciales + No presenciales)	270
<b>Nº de Créditos</b>	10
<b>Fecha de Inicio – Término</b>	Marzo-Julio
<b>Días / Horario</b>	Lunes 10:15 h/viernes 10.15 h
<b>Lugar donde se imparte</b>	Facultad de Ciencias
<b>Profesor Coordinador del curso</b>	Dr. Antonio Galdámez (UChile)
<b>Profesores Colaboradores o Invitados</b>	Dra. Silvana Moris (UCM), Dra. Catalina Cortés (UChile) , Dra. Paulina Valencia-Gálvez (UChile) , M.Sc. Daniela Delgado (Uchile)
<b>Descripción del curso</b>	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.
<b>Objetivos</b>	El objetivo es que los(as) 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.
<b>Contenidos</b>	<ol style="list-style-type: none"><li>1. Difracción de rayos X y cristalografía<ol style="list-style-type: none"><li>1.1 Cristal, celda unitaria, redes de Bravais</li><li>1.2 Densidad cristalina y fórmula química</li><li>1.3 Simetría, grupos espaciales e intensidades de difracción</li><li>1.4 Técnicas en monocristales y polvo policristalino</li><li>1.5 Bases de datos y archivo CIF</li></ol></li><li>2. Poliedros de coordinación y relaciones estructurales<ol style="list-style-type: none"><li>2.1 Empaquetamientos compactos y estructuras tipo</li><li>2.2 Defectos cristalinos y No-estequiometría</li></ol></li></ol>

	<p>2.3 Microscopía electrónica SEM/TEM/HRTEM</p> <p>2.4 Sólidos covalentes y moleculares</p> <p>2.5 Puentes de hidrógeno y contactos intermoleculares</p> <p>2.6 Topología: Introducción a la representación de estructuras cristalinas</p> <p>3. Diagramas de Fase</p> <p>3.1 Sistemas binarios y ternarios</p> <p>3.2 Transiciones de fase, relaciones estructurales grupo-subgrupo</p> <p>3.3 Análisis térmico (TG/DTA/DSC)</p> <p>4. Relación entre estructura y propiedades físicas</p> <p>4.1 Minerales y Silicatos: estructura y propiedades fisicoquímicas</p> <p>4.2 Espinelas inversas: ferrimagnetismo /Difracción de Neutrones</p> <p>4.3 Haluros alcalinos: Conductores iónicos</p> <p>4.4 Silicio y sus aplicaciones: Semiconductores</p> <p>4.5 BaTiO<sub>3</sub>: Ferroelectricidad</p> <p>4.6 PbTe y disoluciones sólidas: Efecto termoeléctrico</p> <p>5. Uso de programas de cristalografía y actividades prácticas</p> <p>5.1 Archivos CIF y visualización de estructuras: Mercury y enCIFer (IUCr)</p> <p>5.2 Resolución Cristalina monocristales: Olex2 crystallographic program</p> <p>5.3 Indexación y visualización de difractogramas de polvo PXR: CHEKCELL y PowderX</p> <p>5.4 Metodología Rietveld: MAUD y FullProf suite</p> <p>5.5 Reconocimiento y clasificación de minerales</p> <p>5.6 Visita a equipos de difracción de rayos X</p>
<p><b>Modalidad de evaluación</b></p>	<p>- El curso se desarrollará con clases expositivas/discusiones semanales, trabajo guiado en programas, trabajo personal en tareas y presentación de un seminario. Modalidad presencial y remota (según participación de la colega de la UCM)</p> <p>- Trabajo asistido/guado con programas de Cristalografía.</p> <p>- La nota Final del curso es el promedio simple de tareas y un seminario.</p>
<p><b>Bibliografía</b></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>➤ R. West, Solid State Chemistry and It`s applications, second edition (student edition), John Wiley and Sons (2014)</li> <li>➤ Ulrich Müller, Inorganic Structural Chemistry, second edition, John Wiley and Sons (2007)</li> <li>➤ 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)</li> <li>➤ L.E. Smart and E. A. Moore, Solid State Chemistry and Introductions, Third edition, Taylor and Francis group (2005)</li> <li>➤ 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)</li> <li>➤ Artículos Científicos seleccionados del área.</li> </ul>

## 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://ruff.info/>
- American Mineralogist Crystal Structure Database. <http://ruff.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, [sofhttps://www.iucr.org/resources/other-directories/software/chekcell](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/>