

DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analítica y Química Física

ASIGNATURA: Cristalografía

CARRERA: Doctorado en Ciencias Químicas PLAN:

CARACTER: Optativo

DURACION DE LA MATERIA: Cuatrimestral

HORAS DE CLASE: a) Teóricas 4hs. b) Problemas 4hs.
c) Laboratorio 4hs. d) Seminarios--hs.e) Totales:12hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Licenciatura en Ciencias Químicas

PROGRAMA

- 1.- Red cristalina y red recíproca. Notación de los elementos geométricos de la red. Conceptos de zona. Relaciones geométricas entre elementos de la Red cristalina.-
- 2.- Simetría puntual. Operaciones y elementos de simetría. Operaciones propias. Operaciones impropias. Grupos puntuales de simetría. Subgrupos y clases de equivalencia.
- 3.- Teoría de las representaciones de los grupos. Tabla de caracteres.
- 4.- Redes de Bravais. Deducción de las redes de Bravais. Sistemas cristalinos. Notación de Bravais Miller.
- 5.- Simetría espacial. Operaciones de simetría con traslación asociada. Grupos espaciales. Posiciones equivalentes particulares y generales.
- 6.- Generalización del concepto de simetría. Simetría con transformación física asociada. Grupos de simetría bicolor. Redes de Bravais y grupos espaciales bicolors.
- 7.-Proyecciones usadas en Cristalografía. Proyección ortogonal. Proyección gnomónicas. Proyección estereográfica. Proyección equiárea.
- 8.- Cálculos efectuados a partir de la morfología del cristal. Cristalometría. Cálculo de los ángulos de la cruz axial. Cálculo de la relación paramétrica. Cálculo de los símbolos de los casos.
- 9.- Rayos X y materia cristalina. Introducción. Espectro del tubo de rayos X. Difracción de los Rayos X. por los cristales. Ecuaciones de Laue. Ecuación de Bragg. Zonas de Brilloim.
- 10.- Técnicas experimentales de monocristal. Método de Laue. Métodos de cristal giratorio y oscilante. Método de Weissenberg. Método de precesión. Difractómetro de cuatro círculos o de monocristal.-

- 11.- Técnicas experimentales de polvo cristalino. Errores en la medida de los espaciados. Difratómetro de polvo. Asignación de los índices a las reflexiones. Relación entre la composición química y el contenido de la celda elemental. Aplicaciones de los diagramas de polvo.
- 12.- Fundamentos de la dinámica cristalina. Estructura atómica. Principio de incerteza. Simetría y mecánica cuántica. Dinámica cristalina.
- 13.- Teoría cuántica del cristal. Enlace químico. Teoría Heitler London. Teoría de orbitales moleculares. Cálculo cuántico para sistemas químicos complejos. Hibridización de orbitales. Ionicidad y covalencia de los enlaces. Energía iónica. Clasificación de las estructuras cristalinas. Reglas de Pauling. Teorema de Bloch. Superficie de Fermi. Cristales aislantes, semiconductores y conductores.
- 14.- Vibraciones en la estructura cristalina. Sistema vibracional de masas puntuales. Vibraciones reticulares. Fonones. Métodos experimentales. Reglas de selección. Análisis de G factor. Calor específico. Factor de temperatura.

BIBLIOGRAFIA

- 1.- The determination of Molecular Structure, P.J.Wheatley, Oxford at the clarendon Press (1960).
- 2.- X Ray Structure Determination, G.A.Stout y L.H. Jensen.
- 3.- X Ray Crystal Structure, D. McLachlan, Jr.; Mc.Graw Hill Book CO Inc.
- 4.- Elementary Crystallography, M.J. Buerger; John Wiley and sons, Inc. N.Y.
- 5.- Cristalografía, J.M.Amigo, M.C.de Brianso, J.L.Brianso, R.Coy Yll. J.S.Huguet; Editorial Rueda, Madrid (1981).

Fecha: Noviembre 1983.-

firma profesor:

Olga

aclaración firma: Dra. Olga Brioux de Mandirola

firma director:

Rodríguez Pasques

aclaración firma:

DR. R. M. RODRIGUEZ PASQUES
DIRECTOR DEPTO.
DCA. INORG. ANAL. Y QCA. FIS.