CURSO DE POSTGRADO

Nombre del curso	Química Estructural
Tipo de curso (Obligatorio, Electivo, Seminario)	Electivo
N° de horas totales (Presenciales + No presenciales)	270
N° de Créditos	10
Fecha de Inicio – Término	Marzo-Julio
Días / Horario	Lunes10:15 h/viernes 10.15 h
Lugar donde se imparte	Facultad de Ciencias
Profesor Coordinador del curso	Dr. Antonio Galdámez (UChile)
Profesores Colaboradores o Invitados	Dra. Silvana Moris (UCM), Dra. Catalina Cortés (UChile) , Dra. Paulina Valencia-Gálvez (UChile) , M.Sc. Daniela Delgado (Uchile)
Descripción del curso	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.
Objetivos	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.
Contenidos	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/HRTEM 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 /Difracción de Neutrones 4.3 Haluros alcalinos: Conductores iónicos 4.4 Silicio y sus aplicaciones: Semiconductores 4.5 $BaTiO_3$: 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 Resolución Cristalina monocristales: Olex2 crystallographic program 5.3 Indexación y visualización de difractogramas de polvo PXRD: CHEKCELL y PowderX 5.4 Metodología Rietveld: MAUD y FullProf suite 5.5 Reconocimiento y clasificación de minerales 5.6 Visita a equipos de difracción de rayos X
Modalidad de evaluación	- El curso se desarrollará con clases expositivas/discusiones semanales, trabajo guiado en programas especializados, trabajo personal en tareas y presentación de un seminario. Modalidad presencial y remota (según participación de la colega de la UCM) - Trabajo asistido/guiado con programas de Cristalografía. - 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 o *enCIFer* and *Mercury* CIF software's for checking, editing and crystal structure visualization from the CCDC, https://www.iucr.org/resources/cif o PowDLL software, http://users.uoi.gr/nkourkou/powdll/ o PowderX program for powder X-ray diffraction data processing, https://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?gl0600 o Chekcell program, sofhttps://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/