

QUÍMICA ESTRUCTURAL

Curso: Electivo

Nivel: Postgrado (Magíster y Doctorado)

Coordinador: Dr. Antonio Galdámez

Semestre y año: primavera 2021

Colaborador: Por definir

Cupos y requisitos: Conocimientos de Química Inorgánica y termodinámica básica. 5 cupos disponibles

Código: Por definir

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 intermolecular 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 básicos 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 y grupos espaciales
 - 1.4 Intensidades de difracción
 - 1.5 Técnicas en monocristales y polvo policristalino
 - 1.6 Bases de datos y archivo CIF
 - 1.7 Indexación de Difractogramas
 - 1.8 Uso del programa mercury (IUCr) y CHEKCELL
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: Representación de estructuras cristalinas

3. Diagramas de Fase

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

4. Relación entre estructura y propiedades físicas

- 4.1 Silicatos: estructura y propiedades químicas
- 4.2 Espinelas inversas: ferrimagnetismo
- 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

Evaluación y metodología

- El curso se desarrollará con clases expositivas, trabajo guiado en programas, trabajo personal en tareas y presentación de un seminario.
- El horario de las clases expositivas serán los viernes de 10:00 a 11:30 h.
- Trabajo asistido/guido con programas de Cristalografía (1,5 h semanales-horario por definir)
- 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/>
- [https://www.britannica.com/science/mineral-chemical-compound/Classification-of-minerals:Mineral - Classification of minerals | Britannica](https://www.britannica.com/science/mineral-chemical-compound/Classification-of-minerals:Mineral-Classification-of-minerals|Britannica)
- American Mineralogist Crystal Structure Database. <http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php>
- IUCr - CWW Teaching and Education in Crystallography: incluye diversos enlaces de interés para Cristalografía. <http://www.iucr.org/cww-top/edu.index.html>

Página que incluye enlaces a Software de cristalografía gratuitos:

Visualization tools

- **enCIFer** CIF checking, editing and visualisation software from the CCDC
- **Mercury** crystal structure visualisation and exploration from the CCDC

<https://www.iucr.org/resources/cif>

Calendario tentativo de Actividades

Tópicos	Número de clases Semanas/días
Por definir	