

20402 Cristal·lografia

Curs 2001/2002

1r semestre

Introducció

Breu història de la Cristal·lografia. Definició i objectius de la Cristal·lografia. Parts de la Cristal·lografia. Relació amb altres ciències.

CRISTAL·LOGRAFIA GEOMÈTRICA

Teoria reticular

El medi cristal·lí. Propietats bàsiques i definidores del medi cristal·lí. Abstracció del medi cristal·lí. Xarxa directa (o real). Fileres reticulars. Plans reticulars. Índexs de Miller. Espaiat reticular. Densitats reticulars. Volum de la cel·la. Matriu mètrica. Xarxa recíproca. Relacions entre la xarxa recíproca i la xarxa directa. Càlculs reticulars. Multiplicitat. Xarxes primitives i xarxes múltiples. Transformació de sistemes de referència.

Morfologia

Matèria monocristal·lina i policristal·lina. Lleis d'observació morfològica. Concepte de zona. Càlculs numèrics relacionats. Goniometria.

Simetria puntual

Simetria finita i infinita. Operacions de simetria. Elements compostos de simetria. Teoremes de les operacions finites de simetria. Representació matricial d'operadors de simetria. Projecció estereogràfica. La simetria en un medi periòdic. Els grups puntuals. Deducció i representació. Notació de Hermann-Mauguin i notació de Schönflies. Grups puntuals no cristal·logràfics. Sistemes cristal·lins. Simetria molecular.

Xarxes cristal·lines

Introducció. Xarxes planes. Simetria puntual de les xarxes planes. Xarxes de Bravais. Simetria puntual de les xarxes de Bravais i relació amb els sistemes cristal·lins.

Simetria espacial

Elements de simetria amb translació. Feixos d'elements de simetria. Grups espacials de simetria. Deducció. Notació. Multiplicitat. Posicions equivalents. Posicions generals i especials.

CRISTAL·LOGRAFIA DE RAIGS X

Els raigs X

Introducció. Producció de raigs X. Espectre continu i discontinu. Lleis de Douanne-Hunt i Moseley. Interacció dels raigs X amb la matèria.

Difracció de raigs X

Condicions geomètriques de difracció. Equació de Laue, construcció d'Ewald, llei de Bragg. Intensitat de difracció. Extincions sistemàtiques. Llei de Friedel. Grups de Laue. Determinació del grup espacial de simetria.

Determinació de l'estructura cristal·lina

Concepte de determinació d'estructura. Factor d'estructura i densitat electrònica. El problema de les fases. Utilitat de la determinació d'estructures cristal·lines.

Difracció de pols

Introducció. La cambra Debye-Scherrer. El difractòmetre de pols. La difracció de pols com a tècnica analítica. El Powder Data File.

Fluorescència de raigs X

Base física. Camp d'aplicació. Anàlisi quantitativa.

CRISTAL·LOQUÍMICA

Introducció a la cristal·loquímica

L'enllaç químic com a criteri de classificació de cristalls. Forces d'atracció i de repulsió. Enllaços forts i enllaços residuals.

Cristalls metàl·lics

L'enllaç metàl·lic. Empaquetaments compactes. Coordinació i poliedres de coordinació. Interstícis. Càlcul de factors d'ocupació.

Cristalls iònics

L'enllaç iònic. Estructures iòniques mes importants. La regla dels radis. Les regles de Pauling.

Cristalls covalents

L'enllaç covalent. Estructures covalents mes importants.

Cristalls moleculars

Les forces residuals com a responsables de la cohesió dels cristalls moleculars. Forces de cohesió interpartícula i intrapartícula. Estudi d'algunes estructures importants.

Estructures paracristal·lines

Introducció. Polímers. Cristalls líquids. Vidres.

Isomorfisme i polimorfisme

Introducció. Estabilitat de les fases. Solucions sòlides. Aspectes termodinàmics i estructurals del polimorfisme. Transicions de fase.