

1ª parte: Rayos X (octubre y Noviembre )

- Características generales de los rayos X
- Producción de los rayos X
- Líneas espectrales: espectros continuos y característicos
- Radiaciones monocromáticas y policromáticas
- Ley de Duane-Hunt
- Ley de Broglie
- Ley de Moseley
- Coeficientes de absorción
- Filtros
- Red recíproca
- Ley de Bragg
- Construcción de Ewald
- Ecuaciones de Laue
- Transformada de Fourier
- Propiedades de la transformada de Fourier
- Factor de estructura
- Correcciones de Lorentz y de Polarización
- Corrección de absorción
- Extinciones sistemáticas
- Reducción de los grupos espaciales
- Ley de Friedel
- Clases de Laue
- Difusión anómala
- Técnicas de monocristal: características generales
- Diagramas de rotación y de oscilación
- Cámara de precesión
- Cámara Weissenberg
- Diagramas de Laue
- Difractómetro automático
- Función de Patterson: definición de propiedades
- Picos de Harker
- Deconvolución de la función de Patterson



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BARCELONA

FACULTAD DE CIENCIAS  
CRISTALOGRAFÍA I MINERALOGÍA

- Métodos directos: bases físicas
- Factores de estructura normalizados
- Factores de temperatura y de escala
- curva K
- Recta de Wilson
- Método de Debye
- Tests de centrosimetría
- Estadística de  $E_h$
- Invariantes de estructura
- Semiinvariantes de estructura
- Definición del origen
- Definición del enantiomorfo
- Ecuaciones de Sayre
- Expresión de la probabilidad
- Fórmula de la tangente
- Métodos de multisolución : Multan
- Fourier de diferencias
- Afinamiento de la estructura cristalina
- Programas de afinamiento
- Representación de la estructura cristalina: Ortep y Pluto
- Difracción de polvo cristalino
- Cámara de Debye-Sherrer
- Difractómetro de dos círculos
- Identificación de fases cristalinas: fichas ASTM
- Deducción de parámetros cristalográficos por diagramas de polvo
- Fluorescencia de rayos X: análisis cualitativo de la muestra.



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BARCELONA

FACULTAD DE CIENCIAS  
CRISTALOGRAFÍA I MINERALOGÍA

2ª parte Otras técnicas instrumentales aplicadas al análisis de materiales

(Diciembre y Enero)

1.- Absorción atómica

- Principios básicos (ley de Lambert-Beer)
- Preparación de muestras minerales
- Preparación de patrones (rectas de calibrado)
- Consideraciones prácticas
- Tratamiento de datos

2.- Técnicas volumétricas (complexometrías)

3.- Técnicas colorimétricas

4.- Campo de aplicación de las técnicas informáticas al análisis estructural

- Configuración general del VAX/VMS
- Manejo práctico de la terminal FACIT
- Instrucciones de acceso al ordenador
- Entrada de datos para algunos programas de cristalografía estructural y de técnicas analíticas.



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BARCELONA

FACULTAD DE CIENCIAS  
CRISTALOGRAFÍA I MINERALOGÍA

3ª parte: CRISTALOQUIMICA I

( Febrero y Marzo )

- 1.- El estado sólido. Propiedades generales. Los rayos X y la estructura cristalina.
- 2.- Estructura de la materia. Antecedentes a la teoría atómica. Partículas fundamentales. Interacción de la luz con la materia. Orígenes de la teoría cuántica. Modelo de Bohr . Numeros cuanticos.
- 3.- Mecánica ondulatoria. Dualidad onda-corpúsculo. Postulado de De Broglie. Principio de Incertidumbre. Postulador de la mecánica ondulatoria. Orbitales atómicos. El átomo de hidrógeno. Atomos multielectrónicos.
- 4.-La tabla periódica. Configuración electrónica y posición en la tabla. Propiedades periódicas.
- 5.- Enlace covalente. Energía y longitud de enlace. Orbitales moleculares. Polaridad de enlace. Momentos dipolares. Electronegatividad. Moléculas diatómicas. Moléculas poliatómicas. Hibridación de orbitales atómicos. Geometría molecular. Algunas estructuras covalentes simples. Radio covalente. Descripción de estructuras típicas. Propiedades características del cristal covalente.
- 6.- Características generales de los compuestos iónicos. Enlace iónico. Algunas estructuras iónicas simples. Radio iónico. Balance de energías en la formación de un sólido iónico. Energía reticular. Ciclo de Born-Haber. Redes cristalinas iónicas. Descripción de estructuras típicas. Propiedades características del cristal iónico.



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BARCELONA

FACULTAD DE CIENCIAS  
CRISTALOGRAFÍA I MINERALOGÍA

4ª parte : CRISTALOQUIMICA II (Mayo)

- 1.- Tipos de enlace en los cristales moleculares.
  - Enlace covalente
  - Enlaces residuales
  - Enlace de Van der Waals
  - Enlace por puente de hidrógeno
- 2.- Concepto de determinación de la estructura en los cristales moleculares
  - Estructuras en los cristales de pequeño peso molecular
  - Estructuras de cristales organometálicos
  - Valencias primarias y secundarias
  - Concepto de ligando
  - Estereoquímica de los cristales organometálicos
- 3.- Estructuras de cristales orgánicos
  - Isomeria en moléculas orgánicas
  - Estereoisomería en moléculas orgánicas
  - Configuración absoluta
  - Regla de Cahn-Ingold-Prelog
  - Aplicación de la difusión anómala en la determinación de la configuración absoluta

7

Procedent:	Lucia PIRAIELLA
Clasa:	4 <sup>o</sup> curs biologie
Perioada:	1984-85
Signat:	<u>I. I. Tricuri</u>
	Cop de Departament
Data:	10/ iunie 1985