



UNIVERSITAT AUTÒNOMA DE BARCELONA

FACULTAT DE CIÈNCIES

CRISTALLOGRAFIA I MINERALOGIA

PROGRAMA DE L'ASSIGNATURA CRISTALLOGRAFIA ESTRUCTURAL

4^{rt} curs de Ciències Geològiques (1985-86)

prof. Dr. J. P. Piniella

1^a part (Raigs X)

1.- ELS RAIGS X

1.1.- Introducció

1.2.- Producció de Raigs X.

1.2.1.- Línies espectrals. Espectre continu i discontinu.

1.2.2.- Llei de Douanne-Hunt.

1.2.3.- Llei de Moseley.

1.3.- Interaccions Raigs X - matèria.

1.3.1.- Efecte fotoelèctric i fluorescència

1.3.2.- Difusió elàstica.

1.3.3.- Altres interaccions Raigs X - matèria.

1.3.4.- Absorció microscòpica. Coeficient d'absorció. Filtres.

1.4.- Aplicacions pràctiques de les interaccions Raigs X - matèria.

1.4.1.- Quadre general de tècniques.

2.- BASE TEORICA

2.1.- Matrius i vectors

2.2.- Transformació de Fourier i operacions relacionades.

2.3.- La funció densitat electrònica.

2.4.- La xarxa recíproca.

2.5.- Condicions de difracció

2.5.1.- Equacions de Laue.

2.5.2.- Construcció d'Ewald.

2.5.3.- Llei de Bragg

3.- METODES DE MONOCRISTAL

3.1.- Característiques generals. Classes de Laue. Llei de Friedel.



UNIVERSITAT AUTÒNOMA DE BARCELONA

FACULTAT DE CIÈNCIES

CRISTAL·LOGRAFIA I MINERALOGIA

- 3.2.- El mètode de Rotació. El mètode d'oscil.lació.
- 3.3.- El mètode de Weissenberg.
- 3.4.- El mètode de Precessió
- 3.5.- El mètode de Laue. Lauegrames.
- 3.6.- Determinació de paràmetres cristal.lins.
- 3.7.- Extincions sistemàtiques. Determinació del Grup Espacial.
- 3.8.- El difractòmetre automàtic.
- 3.9.- Correccions de Lorentz i de Polarització.
- 3.10.- Correcció d'absorció.

- 4.- EL PROBLEMA DE LES FASES
- 4.1.- Normalització. Plot de Wilson.
- 4.2.- Tests de Centre-simetria
- 4.3.- Mètodes de Fourier
 - 4.3.1.- La funció Patterson.
 - 4.3.2.- El mètode de l'àtom pesat. Principi de la diferència de densitat electrònica.
 - 4.3.3.- Seccions de Harker.
 - 4.3.4.- Càlculs numèrics en síntesi de Fourier.
- 4.4.- Mètodes directes.
 - 4.4.1.- Bases físiques.
 - 4.4.2.- Fórmules fonamentals. Equacions de Sayre. Fórmula de la tangent.
 - 4.4.3.- Definició de l'origen. Elecció del conjunt de partida.
 - 4.4.4.- Mètodes de multi-solució. Multan.

- 5.- AFINAMENT
- 5.1.- Afinament de l'estructura cristal.lina.
- 5.2.- Programes d'afinament.

- 6.- REPRESENTACIÓ D'ESTRUCTURES CRISTAL.LINES
- 6.1.- Programes Ortep i Pluto.
- 6.2.- El programa Ester.



UNIVERSITAT AUTÒNOMA DE BARCELONA

FACULTAT DE CIÈNCIES

CRISTAL·LOGRÀFIA I MINERALOGIA

7.- DIFRACCIO DE POLS CRISTAL.LINA.

7.1.- Cambra Debye-Scherrer.

7.2.- Difractòmetre de pols.

7.3.- Identificació de fases cristal.lines. Fitxes ASTM.

7.4.- Deducció de paràmetres cristal.logràfics per difracció de pols.

8.- FLUORESCENCIA DE RAIGS X

8.1.- Anàlisi qualitativa de la mostra.

8.2.- Anàlisi quantitativa de la mostra.

2^a part (Cristal.loquímica) :

1.- L'ESTAT SOLID. Introducció.

2.- ESTRUCTURA DE LA MATERIA

2.1.- Introducció

2.2.- Estructura de l'àtom

2.3.- Estructura electrònica dels elements.

2.4.- Classificació dels elements. Sistema periòdic.

2.5.- Abundància natural dels elements.

3.- ENLLAQ QUIMIC EN ELS CRISTALLS

3.1.- Introducció

3.1.1.- Introducció a la teoria de valència.

3.1.2.- Estructura electrònica i reactivitat dels àtoms.

3.1.3.- Propietats característiques de les diferents espècies atòmiques.

3.2.- Forces d'enllaç

3.3.- Forces d'atracció

3.3.1.- Enllaços forts o enllaços de valència.

3.3.1.1. Enllaços iònics

3.3.1.2. Enllaços covalents

3.3.1.3. Enllaços metàl·lics.

3.3.1.4. Interaccions ion-dipol.

3.3.2.- Enllaços débils.



UNIVERSITAT AUTÒNOMA DE BARCELONA

FACULTAT DE CIÈNCIES

CRISTALLOGRAFIA I MINERALOGIA

- 3.3.2.1. Enllaços Van der Waals.
- 3.3.2.2. Forces de transferència de càrrega.
- 3.3.2.3. Enllaç per pont d'hidrógen.
- 3.4.- Forces de repulsió
 - 3.4.1.- Forces de repulsió electrostàtiques.
 - 3.4.2.- Forces de repulsió de Born.
- 3.5.- L'equilibri entre forces d'atracció i forces de repulsió.
- 3.6.- Tipus de cristalls.

4.- CRISTALLS METAL·LICS.

- 4.1.- Introducció
- 4.2.- Metall purs
 - 4.2.1.- Empaquetaments compactes. Factors d'ocupació.
 - 4.2.2.- Estructures de diferents metalls.
 - 4.2.3.- Energia reticular dels metalls.
 - 4.2.4.- Propietats característiques dels metalls.
- 4.3.- Aliatges
 - 4.3.1.- Generalitats.
 - 4.3.2.- Aliatges primaris
 - 4.3.3.- Fases de Laves.
 - 4.3.4.- Aliatges de Hume-Rothery.
 - 4.3.5.- Solucions intersticials.
- 4.4.- La teoria de bandes en l'enllaç metàl·lic.

5.- CRISTALLS IONICS

- 5.1.- Introducció
- 5.2.- L'energia reticular dels cristalls iònics. Constant de Madelung. Cicle de Born-Haber.
- 5.3.- Descripció d'estructures.
 - 5.3.1.- Compostos MX.
 - 5.3.1.1. Descripció de tipus estructurals.
 - 5.3.1.2. La regla dels radis.
 - 5.3.2.- Compostos MX_2 .
 - 5.3.3.- Compostos M_2X
 - 5.3.4.- Compostos ternaris.



UNIVERSITAT AUTÒNOMA DE BARCELONA

FACULTAT DE CIÈNCIES

CRISTAL·LOGRÀFIA I MINERALOGIA

5.4.- Regles de Pauling.

5.5.- Estudi de l'energia cristal·lina.

6.- CRISTALLS COVALENTS

6.1.- Introducció

6.2.- Teoria de l'enllaç de valència.

6.3.- El concepte de valència segons la mecànica quàntica.

La hibridació d'orbitals.

6.4.- Teoria dels orbitals moleculars.

6.5.- Radis covalents.

6.6.- Algunes estructures covalents senzilles.

6.6.1.- Estructura blenda wurtzita, diamant.

6.6.2.- Compostos AB.

6.6.3.- Compostos AB₂.

7.- CRISTALLS MOLECULARS.

7.1.- Tipus d'enllaç en els cristalls moleculars.

7.2.- Concepte de determinació d'estruatura en els cristalls moleculars.

7.3.- Estructures de cristalls moleculars de petit pes molecular.

7.4.- Cristalls de molècules orgàniques.

7.4.1.- Isomeria i esteroisomeria en molècules orgàniques.

7.4.2.- Configuració absoluta. Regla de Cahn-Ingold-Prelog.

7.5.- Cristalls de compostos de coordinació.

7.5.1.- Valències primàries i secundàries.

7.5.2.- Concepte de lligand.

7.5.3.- Estereoquímica en compostos de coordinació.

7.5.4.- Teories sobre sompostos de coordinació

7.6.- Aplicació de la difusió anòmala en la determinació de la configuració absoluta.

=====



UNIVERSITAT AUTÒNOMA DE BARCELONA

FACULTAT DE CIÈNCIES

CRISTAL·LOGRAFIA I MINERALOGIA

3^a part (Problemes i pràctiques)..- Cada alumne haurà de realitzar de forma pràctica la resolució d'una estructura cristal·lina utilitzant els programes d'ordinador adients, processats mitjançant el Centre de Càlcul de la U.A.B... Amb aquesta finalitat els alumnes disposaran d'un compte de docència per accedir a l'ordinador.

4^a part (Problemes i pràctiques)..- Es plantearà a cada alumne un problema pràctic d'identificació de fases cristal·lines. La mostra es donarà a principis del segon trimestre i per la seva resolució s'usaran diferents tècniques analítiques a discutir entre l'alumne i el professor.

5^a part (problemes i pràctiques)..- A principis de curs es donarà a cada alumne dos treballs de recerca publicats en alguna revista nacional o estrangera sobre la qual s'hauran de realitzar els següents treballs:

- a) Traducció al castellà o el català de l'article.
- b) Comentari, d'un o dos fulls, de cada una de les tècniques mencionades en l'article;
- c) Localització i resum de cada una de les cites bibliogràfiques, incloses les referències a programes d'ordinador si resulta possible (s'adjuntarà fotocòpia de les referències interessants).
- d) Judici crític personal de l'article, incidint especialment sobre els aspectes cristal·loquímics, cristal·lofísics, mineralògics etc.

L'extensió d'aquest apartat es deixa a criteri de l'alumne.