

Programa

1. TEORIA RETICULAR

- 1.1. El medi cristal·lí com un reticle periòdic:
nusus-vectors de translació
cel·la fonamental: contingut, simetria
fileres reticulars: índexs de Miller, densitat reticular lineal, f.r. importants
plans reticulars: índexs de Miller, seqüència (o espaiat reticular),
densitat reticular plana, p.r. importants
la llei de la constància dels angles diedres
càlcul morfològic-cristal·logràfic
- 1.2. Xarxa recíproca
les dues definicions
vectors de translació recíprocs
iteració
relacions amb la xarxa directa:
volum cel·la fonamental
vector recíproc perpendicular als plans de la xarxa directa, espaiat reticular
vector directe perpendicular als plans de la xarxa recíproca
- 1.3. Les catorze xarxes de Bravais
els set tipus de cel·les fonamentals o sistemes de referència:
volum de la cel·la fonamental
matriu mètrica
cel·les primitives i cel·les múltiples: multiplicitat
les catorze xarxes de Bravais: nusos addicionals, vectors addicionals
els set sistemes cristal·lins
canvi del sistema de referència

2. SIMETRIA ESPACIAL

- 2.1. Introducció: La Simetria Espacial
és la simetria interna dels cristalls
te en compte la translació (nous elements de simetria)
els conjunts d'operacions de simetria espacial ténen estructura de grup: G.E.S.
els grups espacials deriven dels G.P.S.: nomenclatura, multiplicitat; exemple C_{2h}
- 2.2. Operacions i elements de simetria espacial
combinació eixos de rotació * translació: eixos helicoidals
eix binari * translació: eix binari helicoidal; exemples
eix ternari * translació: eixos ternaris helicoidals; exemples (quars)
eix quaternari * translació: eixos quaternaris helicoidals;
eix senari * translació: eixos senaris helicoidals; exemples (quars)

combinació plans de reflexió * translació: plans de lliscament
combinació centre d'inversió * translació
combinació eixos d'inversió * translació

- 2.3. Els grups espacials de simetria
nomenclatures per sistemes cristal·lins
multiplicitats
posicions generals i posicions especials: exemple C_{2h}
els grups espacials de simetria deriven dels grups puntuals: exemples
"repàs": operacions de simetria pròpies (rotacions) i impròpies; objectes quirals;
G.P.S. i G.E.S. quirals: exemples del quarz

3. DIFRACCIÓ DE RAIGS X

- 3.1. Introducció
radiació electromagnètica
interacció raigs X - matèria cristal·lina
descobriment i aplicacions de la difracció
- 3.2. A cada pla reticular li correspon una direcció difractada
triangle de difracció
equacions de Laue
lleis de Bragg
- 3.3. Factor d'estructura
exponencial complexa
quadrat del factor d'estructura (proporcional a la intensitat difractada)
factor de difusió atòmica
exemple: càlcul de F_{100} i F_{111} pel NaCl
- 3.4. Esfera d'Ewald
condició de difracció
nombre màxim de reflexions
- 3.5. Difracció de pols
conus de difracció
geometria del difractòmetre de pols standard
intensitats
orientació preferencial
multiplicitat
fitxes del Powder Diffraction File
- 3.6. Extincions Sistemàtiques
per xarxes múltiples
per plans de lliscament
per eixos helicoidals
- 3.7. Obtenció de raigs X
tubs clàssics
ànode rotatori
sincrotró

Bibliografia recomenada

Cristal·lografia. Teoria Reticular, Grups Puntuals i Grups Espacials
SALVADOR GALÍ MEDINA, Edicions de la Universitat de Barcelona

An Introduction to Crystal Chemistry
R.C. EVANS, Cambridge University Press

Crystallography
WALTER BORCHARDT-OTT, Springer Verlag

Introduction to Mineral Science
A. PUTNIS, Cambridge University Press

Cristalografia
J.M. AMIGO, J.L. BRIANSO, M.C. BRIANSO, R. COY, J. SOLANS, Ed. Rueda

Introducción a la Cristalografia
D.E. SANDS, editorial reverté, s.a.

Essentials of Crystallography
DUNCAN McKIE / CHRISTINE McKIE, Blackwell Scientific Publications

Introduction à la Cristallographie et à la Chimie Structurale
M. VAN MEERSSCHE et J. FENEAU-DUPONT, Oyez

Fundamentals of Crystallography
C. GIACOVAZZO et al., The International Union of Crystallography, Oxford Science Publications

International Tables for Crystallography. Volume A: Space-Group Symmetry
T. HAHN, editor, The International Union of Crystallography, D. Reidel Publishing Company (Teaching edition)

Eugènia Estop

Bellaterra, 19 de febrer de 2002