



Universitat Autònoma de Barcelona

TITULACIÓ: Química

NOM DE L'ASSIGNATURA: 20402 Cristal·lografia

CURS: 2002/2003

CRÈDITS: 6

TEMARI DE TEORIA

- 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. Índex de Miller. Plans reticulars. Espaiat reticular. Volum de la cel·la. Matriu mètrica. Xarxa recíproca. Relacions entre la xarxa recíproca i la xarxa directa. 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. Geometria.

- 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. Projectió estereogràfica. La simetria en un medi periòdic. Els grups puntuals. Deducció i representació. Notació de Hermann-Mauguin i notació de Schönflies. Sistemes cristal·lins. Simetria molecular.

- Xarxes cristal·lines

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 i cristal·loquímica

- 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. Llei de Bragg, equació de Laue, construcció d'Ewald. Factor d'estructura. Extincions sistemàtiques. Llei de Friedel. 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.

- 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. Càlcul de factors d'ocupació. Coordinació i políedres de coordinació.

- Cristalls iònics

L'enllaç iònic. Energia reticular. La constant de Madelung. 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.