

# CRISTAL·LOGRAFIA II curs 2005-06

## Programa

1. TEORIA RETICULAR (Repàs parcialment)
2. SIMETRIA PUNTUAL (Repàs)
3. SIMETRIA ESPACIAL
4. DIFRACCIÓ DE RAIGS X
5. MACLES I DEFECTES CRISTAL·LINS

## 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 Cristalografía**

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)

## 1. TEORIA RETICULAR

### 1.1. El medi cristal·lí com un medi periòdic (Repàs)

1.1.1. nusos, cel·la fonamental

1.1.2. fileres reticulars, índex de Miller (exercicis); plans reticulars, índex de Miller (exercicis)

1.1.3. nocions de morfologia cristal·lina; la llei de la constància dels angles diedres

### 1.2. Cel·les fonamentals – Sistemes Cristal·lins – Xarxes de Bravais (Repàs)

1.2.1. els set tipus de cel·les fonamentals

1.2.2. els set sistemes cristal·lins

1.2.3. les catorze xarxes de Bravais; cel·les primitives, cel·les múltiples (exercicis)

1.2.4. càlcul morfològic-cristal·logràfic, matriu mètrica (exercicis)

### 1.3. Xarxa recíproca

1.3.1. definició

1.3.2. volum de la cel·la fonamental recíproca

1.3.3. vector recíproc perpendicular als plans reticulars de la xarxa directa

1.3.4. espaiat reticular

1.3.5. exercicis

## 2. SIMETRIA PUNTUAL (Repàs)

2.1. Orientació de les sis cel·les fonamentals en projecció estereogràfica (exercicis)

2.2. Criteris de nomenclatura dels grups puntuals

2.3. Índexs de Miller en els sistemes trigonal i hexagonal (exercicis)

2.4. Multiplicitat dels grups puntuals, posicions generals i posicions especials (exercicis)

2.5. Objectes quirals, grups puntuals quirals; exemple del quars

### 3. SIMETRIA ESPACIAL

3.1. Simetria espacial bidimensional: elements de simetria, xarxes, grups (exercicis)

3.2. Simetria espacial (tridimensional)

3.2.1. Introducció

3.2.2. Interacció de les operacions de simetria puntual amb la translació

3.2.3. Els eixos helicoidals (exercicis)

3.2.4. Els plans de lliscament (exercicis)

3.3. Els grups de simetria espacial

3.3.1. Deducció dels grups espacials

3.3.2. Nomenclatura

3.3.3. Multiplicitat, posicions generals i posicions especials

3.3.4. Representació gràfica

3.3.5. Exemples, exercicis

3.3.6. Deducció de la simetria a partir de les coordenades de posicions equivalents (exercicis)

3.3.7. Grups espacials del quars

### 4. DIFRACCIÓ DE RAIGS X PELS CRISTALLS

4.1. Introducció (rx1.ppt)

4.2. Producció dels raigs X (rx1.ppt)

4.3. Teoria de la difracció dels raigs X (rx2.ppt)

4.3.1. Triangle de difracció

4.3.2. Amplitud de l'ona difosa per un cristall

4.3.3. Factor d'estructura

4.3.4. Factor de difusió atòmica

- 4.4. Condicions geomètriques de difracció (rx3.ppt)
  - 4.4.1. Equacions de Laue
  - 4.4.2. Llei de Bragg
  - 4.4.3. Esfera d'Ewald
  
- 4.5. Intensitats
  - 4.5.1. Llei de Friedel, Grups de Laue
  - 4.5.2. Extincions sistemàtiques (rx4.ppt)
    - 4.5.2.1. Introducció
    - 4.5.2.2. Xarxes múltiples, exemple
    - 4.5.2.3. Plans de lliscament
    - 4.5.2.4. Eixos helicoidals
    - 4.5.2.5. Exercicis
  
- 4.6. Difracció de pols (rx5.ppt)
  - 4.6.1. Introducció
  - 4.6.2. Difracció de pols – esfera d'Ewald
  - 4.6.3. Difractometria estàndar
  - 4.6.4. Orientació preferencial
  - 4.6.5. Multiplicitat dels pics de difracció (exercicis)
  - 4.6.6. Altres factors que intervenen en les intensitats dels pics de difracció
  - 4.6.7. Exemples d'estructures cúbiques senzilles
  
- 4.7. Altres mètodes de difracció (rx6.ppt)