

## QUÍMICA ESTRUCTURAL

**Curso:** Electivo

**Nivel:** Postgrado

**Coordinador:** Dr. Antonio Galdámez

**Semestre y año:** primavera 2019

### **Descripción**

Curso electivo especializado en el área de Química del estado sólido y cristalografía dirigido a estudiantes de postgrado del área científica. También puede ser cursado por estudiantes de pregrado que necesiten cursos para magister vinculante o electivos de especialidad. Este curso tiene énfasis en la interpretación de propiedades fisicoquímicas a partir de la estructura cristalina y de las fuerzas intra e intermolecular en sólidos extendidos. Además, tiene por objetivo introducir a las descripciones topológicas de las estructuras cristalinas. Este curso considera actividades teóricas y prácticas; como es el reconocimiento de minerales (actividad práctica), tareas, seminario y la utilización de programas básicos de cristalografía.

### **Objetivo**

El objetivo es que los alumnos(as) adquieran conocimientos de química del estado sólido y cristalografía que les permita interpretar las propiedades fisicoquímicas que presentan distintos sistemas extendidos. Además, introducir a las siguientes técnicas de caracterización: Difracción de rayos X, Microscopía electrónica y Análisis térmico.

**Prerrequisitos:** Química Inorgánica y Fisicoquímica

### **Contenidos**

1. Difracción de rayos X y cristalografía
  - 1.1 Cristal, celda unitaria, redes de Bravais
  - 1.2 Densidad cristalina y fórmula química
  - 1.3 Simetría y grupos espaciales
  - 1.4 Intensidades de difracción
  - 1.5 Uso del programa mercury (IUCr)
2. Poliedros de coordinación y relaciones estructurales
  - 2.1 Empaquetamientos compactos y estructuras tipo
  - 2.2 Defectos cristalinos y No-estequiometría
  - 2.3 Microscopía electrónica SEM/TEM
  - 2.4 Sólidos covalentes y moleculares
  - 2.5 Puentes de hidrógeno y contactos intermoleculares
  - 2.6 Topología: Representación de estructuras cristalinas

### 3. Diagramas de Fase

- 3.1 Sistemas binarios y ternarios
- 3.2 Transiciones de fase
- 3.3 Relaciones estructurales grupo-subgrupo
- 3.4 Análisis térmico (TG/DTA/DSC)
- 3.5 Silicatos: estructura y propiedades químicas
- 3.6 Actividad experimental: Reconocimiento y clasificación de minerales y gemas

### 4. Relación entre estructura y propiedades físicas

- 4.1 Espinelas inversas: ferrimagnetismo
- 4.2 Haluros alcalinos: Conductores iónicos
- 4.3 BaTiO<sub>3</sub>: Ferroelectricidad
- 4.4 PbTe y disoluciones sólidas: Efecto termoeléctrico

### Evaluación y metodología

El curso se desarrollara con clases expositivas (1,5 h por semana), trabajo personal en tareas (4 h por semana) y presentación de un seminario. Total horas semanales: 5,5 horas

La nota Final del curso es el promedio de tres tareas y un seminario.

### Bibliografía

- A. R. West, *Solid State Chemistry and It's applications*, second edition (student edition), John Wiley and Sons, 2014
- Ulrich Müller, *Inorganic Structural Chemistry*, second edition, John Wiley and Sons, 2007
- Carlos Pico m, M luisa López G y M luisa Veiga B, *Cristaloquímica de Materiales. De la estructura a las propiedades de los sólidos inorgánicos*, Editorial síntesis S.A., [www.sintesis.com](http://www.sintesis.com)
- L.E. Smart and E. A. Moore, *Solid State Chemistry and Introductions*, Third edition, Taylor and Francis group, 2005
- B.G. Hyde and S. Andersson, *Inorganic Crystal Structures*, John Wiley and Sons, 1989
- D. M. Adams, *Inorganic Solids An Introductions to concepts in Solid state Structural chemistry*, John Wiley and Sons, 1974