

TEMARIO TEÓRICO: CRÍSTALOQUÍMICA. ANÁLISIS ESTRUCTURAL

1. Principios que regulan la arquitectura estructural. Coordinación. Polarización y contrapolarización. Principios de la Cristalografía. Reglas de Pauling.
2. Estructuras de los elementos. Empaquetados densos. Estructuras de Coordinación.
3. Estructuras con radicales islas. Estructuras en cadena. Estructuras en hojas. Estructuras de armazón tridimensional.
4. Estructuras moleculares. Tipos morfológicos de las estructuras moleculares.
5. Cristal Real. Concepto de cristal mosaico. Tipos y clasificación de los diferentes defectos cristalinos. Defectos puntuales. Defectos Lineales. Defectos bidimensionales. Defectos tridimensionales.
6. Isomorfismo y solución sólida. Isomorfismo y serie isomorfica. Solución sólida y serie de solución sólida. Tipos de soluciones sólidas. Transformaciones orden-desorden en soluciones sólidas. Cristalografía del ordenamiento. No estequiometría y orden. Procesos de ordenamiento. Fenómenos de segregación de fases. Estructuras moduladas.
7. Polimorfismo. Ecuaciones termodinámicas fundamentales. Clasificación de las transformaciones polimorfas. Transformaciones que afectan a la primera esfera de coordinación. Transformaciones que afectan a esferas de coordinación de orden superior. Transformaciones orden-desorden. Influencia de las impurezas.
8. Naturaleza de los Rayos-X. Obtención de los Rayos-X. Tubos de Rayos-X. Espectro de las radiaciones emitidas por un tubo de Rayos-X. Ley de Moseley.  
Radiación Sincrotrón. Obtención y características. Fuentes de radiación Sincrotrón en el mundo.
9. Interacción de los Rayos-X con la materia. Descripción general de los diferentes fenómenos de interacción. Absorción de los Rayos-X por la materia.  
Fundamento y empleo de filtros. Radiación dispersa incoherente. Efecto Compton.
10. Dirección de los haces difractados. Fundamentos. Principio de superposición de ondas. Condiciones generales de difracción. Ecuaciones de Laue.  
Significado geométrico del vector dispersión. El vector dispersión y la ley de Bragg. La esfera de reflexión.
11. Intensidad de los rayos difractados. Generalidades. Intensidad de la radiación dispersa por un electrón libre. Dispersión de la radiación por un átomo. El factor de dispersión atómico. Dispersión de la radiación por un grupo de átomos. Factor de estructura.
12. El problema de la fase. Simetría de los efectos de radiación. Ley de Friedel. Ausencias o extinciones sistemáticas. Determinación del grupo espacial.  
Intensidad integrada. Factores de corrección.
13. Métodos experimentales de difracción. Su relación con el espacio recíproco y la esfera de reflexión. Método de Laue. Método del cristal giratorio. Método del cristal oscilante. Método de Weisseberg.
14. Método del polvo cristalino. Método de Debye-Scherrer. Influencia de las características de la muestra sobre los diagramas. Fuentes de error. El difractómetro de polvo. Sistema óptico. Detectores. Métodos de medida de intensidades. Preparación de muestras. Su problemática. Cristales

Código Seguro de verificación: ++G5N1LrLQ/g6Td8AYz+Wg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>  
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	1/4



monocromadores.

15.Aplicaciones generales del método del polvo. Asignación de índices a la reflexiones. Determinación de parámetros estructurales. Determinación precisa de las dimensiones de la celdilla unidad. Identificación de fases cristalinas. Análisis cuantitativo de fases cristalinas.

16.Aplicaciones especiales del método del polvo. Estudio de soluciones sólidas metálicas. Estudios de texturas metálicas. Determinación del tamaño de los cristalitas. Determinación de coeficiente de dilatación térmica.

Código Seguro de verificación: ++G5N1LrLQ/g6Td8AYz+Wg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>  
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	2/4



TEMARIO PRÁCTICO: CRISTALOQUÍMICA. ANÁLISIS ESTRUCTURAL

1. Obtención y lectura de un diagrama de polvo por el método Debye-Scherrer.
2. Obtención y lecturas de un diagrama de polvo por el método difractométrico.
3. Determinación de fases cristalinas.
4. Asignación de índices a las reflexiones y determinación de parámetros estructurales.
5. Variación del parámetro de celda en sistemas binarios.

Nota: Todas las prácticas se realizarán en los laboratorios del Departamento y en los laboratorios de difracción de Rayos-X del Servicio Central de Ciencia y Tecnología de la UCA (Facultad de Ciencias)

Campus Universitario de Puerto Real. Polígono Río San Pedro s/n.11510. Puerto Real (Cádiz). Spain. Tel: 34-956-016300 . Fax: 34-956-016288

1/1

Código Seguro de verificación: ++G5N1LrLQ/g6Td8AYz+Wg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>  
Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	3/4



++G5N1LrLQ/g6Td8AYz+Wg==

**BIBLIOGRAFÍA: CRISTALOQUÍMICA. ANÁLISIS ESTRUCTURAL**

- Amoros, J. L. El cristal. Atlas. Madrid (1990)  
 Bermúdez-Polonio, J. Métodos de difracción de Rayos-X. Principios y aplicaciones. De. Pirámide S.A. Madrid (1981)  
 Bloss, F.D. Crystallography and Crystal Chemistry. Holt, Rinehart and Wiston. New York (1971)  
 Cullity, B.D. Elements of X-ray diffraction. Addison-Wesley Reading. Massachusetts (1978)  
 Vainshtein, B.K. Modern Crystallography 1. Fundamentals of crystals. Symmetry and methods of Structural Crystallography. Springer-Verlag. Berlín (1994)  
 Vainshtein, B. K. Modern Crystallography II. Structure of Crystals. Springer-Verlag. Berlín (1982).

Campus Universitario de Puerto Real. Polígono Río San Pedro s/n. 11510. Puerto Real (Cádiz). Spain. Teli: 34.956.016300 . Fax: 34.956.016288

Código Seguro de verificación: ++G5N1LrLQ/g6Td8AYz+Wg==. Permite la verificación de la integridad de una copia de este documento electrónico en la dirección: <https://verificarfirma.uca.es>  
 Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la Ley 59/2003, de 19 de diciembre, de firma electrónica.

FIRMADO POR	MARIA DEL CARMEN JAREÑO CEPILLO	FECHA	29/05/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	4/4



++G5N1LrLQ/g6Td8AYz+Wg==