

PLAN DOCENTE DE ASIGNATURA

CÓDIGO NOMBRE

Asignatura	206035	CRISTALOQUÍMICA. ANÁLISIS ESTRUCTURAL
Titulación	0206	LICENCIATURA EN QUÍMICA
Departamento	C113	CRISTAL. Y MINERAL., ESTRAT. Y GEODINAM Y PETROLOG. Y GEOQUIMICA
Curso	-	
Duración (A: Anual, 1Q/2Q)	2Q	
Créditos ECTS	5,4	
Créditos Teóricos	4	
Créditos Prácticos	2	
Tipo	Optativa	

Profesores	M. Antonio Caballero López-Lendínez
Objetivos	El alumno al final del curso debe conocer los diferentes tipos estructurales de sólidos cristalinos y los principios que los regulan, así como las relaciones entre la red recíproca y la esfera de Ewald, determinar la dirección de los haces difractados, calcular la intensidad de una reflexión determinada conociendo las posiciones atómicas, determinar la existencia de ausencias sistemáticas y el grupo espacial de un cristal, asignar índices a las reflexiones de un diagrama. Conocer algunas aplicaciones especiales del método del polvo cristalino.

Código Seguro de verificación: Eb6rfWz2ee1334bq28Zmgw==. 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	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	1/5



Eb6rfWz2ee1334bq28Zmgw==

Programa	<p>1.- Principios que regulan la arquitectura estructural. Coordinación. Polarización y contrapolarización. Principios de la Cristalografía. Reglas de Pauling.</p> <p>2.- Estructuras de los elementos. Empaquetados densos. Estructuras de Coordinación.</p> <p>3.-Estructuras con radicales islas. Estructuras en cadena. Estructuras en hojas. Estructuras de armazón tridimensional.</p> <p>4.- Estructuras moleculares. Tipos morfológicos de las estructuras moleculares.</p> <p>5.-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.</p> <p>6.-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.</p> <p>7.-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.</p> <p>8.- 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.</p> <p>9.- El problema de la fase.</p>
----------	--

Código Seguro de verificación:Eb6rfWz2ee1334bq28Zmgw==. 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	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	2/5



Eb6rfWz2ee1334bq28Zmgw==

	<p>Simetría de los efectos de radiación. Ley de Friedel. Ausencias o extinciones sistemáticas. Determinación del grupo espacial. Intensidad integrada. Factores de corrección.</p> <p>10.- 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 Weissenberg.</p> <p>11.- 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 monocromadores.</p> <p>12.- 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.</p> <p>13.- Aplicaciones especiales del método del polvo. Estudio de soluciones sólidas metálicas. Estudios de texturas metálicas. Determinación del tamaño de los cristalitos. Determinación del coeficiente de dilatación térmica.</p> <p>14.- Determinación de las posiciones atómicas. Función de Patterson. Métodos con átomos pesados. Métodos directos. Refinamiento.</p>
Metodología	Clases teóricas, Seminarios, clases prácticas y experimentación en laboratorio.

Código Seguro de verificación:Eb6rfWz2ee1334bq28Zmgw==. 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	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	Eb6rfWz2ee1334bq28Zmgw==	PÁGINA 3/5
 Eb6rfWz2ee1334bq28Zmgw==			

TÉCNICAS DOCENTES	TÉCNICAS DOCENTES		
	Sesiones académicas teóricas: Sí	Exposición y debate: No	Tutorías especializadas: Sí
	Sesiones académicas Prácticas: Sí	Visitas y excursiones: No	Controles de lecturas obligatorias: No
	Otros (especificar):		
Criterios y sistemas de evaluación	EXAMEN (Fundamentalmente de tipo Practico) 80% Y MEMORIA DE PRÁCTICAS 20%		
Recursos bibliográficos	<p>. Amoros, J. L. El cristal. Atlas. Madrid (1990)</p> <ul style="list-style-type: none"> • Bermúdez-Polonio, J. Métodos de difracción de Rayos-X. Principios y aplicaciones. 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 Symmetry and methods of Structural Crystallography. Springer-Verlag Berlín(1994) • Vainshtein, B. K. Modern Crystallography II. Structure of Crystals. Springer-Verlag. Berlín (1982). <p>Internacional Tables for Crystallography. Vol A,B,C. The Internacional Union of Crystallography. KluwerAcademic Publishers. Boston (1993).</p>		

Código Seguro de verificación:Eb6rfWz2ee1334bq28Zmgw==. 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	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	4/5



Eb6rfWz2ee1334bq28Zmgw==

Código Seguro de verificación: Eb6rfWz2ee1334bq28Zmgw==. 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	13/07/2017
ID. FIRMA	angus.uca.es	PÁGINA	5/5



Eb6rfWz2ee1334bq28Zmgw==