

Determinación Estructural

(Parte Químico Física)

Víctor Luaña

Departamento de Química Física y Analítica, Universidad de Oviedo
Curso 2002-2003

Areas de Conocimiento: Química Física y Química Orgánica

Departamentos: Química Física y Analítica junto a Química Orgánica e Inorgánica.

Curso: 2002-2003

Curso: Tercero, **Ciclo:** Segundo, **Cuatrimestre:** Primero,

Especialidad: Común, **Caracter:** Troncal,

Periodicidad: 5 Horas/Semana, **Créditos:** 3 (QF) y 4.5 (QO),

Tipo de Evaluación: Examen Final,

Aprobado: $0.4n_{QF} + 0.6n_{QO} \geq 5$, $n_{QF} \geq 4$ y $n_{QO} \geq 4$,

Exámenes (QF): 2002-12-04/17-21, 2003-06-13/17-21, 2003-09-10/9-12:30

Clases (QF): Lu-Vi/12-13/aula 13 (grupo A), Lu-Vi/16-17/aula 01 (grupo C)

Profesores: Víctor Luaña (A y C) y Ángel Aguirre Pérez (B)

E-mail: victor@nitrogeno.quimica.uniovi.es

Webpage: <http://www.uniovi.es/~quimica.fisica/qcg/asignaturas.html>

Temario:

- L1: Simetría molecular y representación matricial de los grupos puntuales de simetría.** Geometría molecular. Simetría puntual, elementos y operaciones de simetría. Grupos de operaciones de simetría. Los grupos de simetría molecular. Simetría de moléculas prototipo. Teoría de las representaciones matriciales de los grupos. Tablas de caracteres de los grupos puntuales de simetría. Producto directo de representaciones. Base de vectores propios de las *irreps* de un grupo. Operadores de proyección. Aplicaciones: actividad óptica, propiedades vectoriales y tensoriales, vibraciones moleculares.
- L2: Simetría cristalina, grupos espaciales y descripción de la estructura de un cristal.** Redes cristalinas. Elementos de simetría en un cristal. Celdillas primitivas y centradas. Grupos espaciales. Tablas internacionales de cristalografía. Descripción cristalográfica de un cristal. Geometría básica del cristal. Ejemplos de estructuras cristalinas. Definición y propiedades de la red recíproca.
- L3: Difractometría: Fundamentos.** Dispersión de radiación. Interferencia entre ondas

dispersadas. Dispersión por átomos y moléculas. Efectos térmicos. Difracción en un cristal: ecuaciones de Laue. Ley de Bragg. Esfera de Ewald. Uso de la simetría en la red recíproca. Intensidades de difracción. Correcciones a las intensidades medidas. Síntesis de Fourier y el problema de la fase. Integral de convolución y el teorema de convolución. Determinación experimental de la densidad electrónica.

L4: Difractometría: Técnicas experimentales y de tratamiento de datos.

Técnicas de medición. Determinación de la celda unidad y del grupo espacial. Correcciones sobre los datos medidos: de Lorentz, polarización, absorción y extinción. Resolución de la estructura: método de Patterson, métodos directos, Refinamiento estructural: síntesis de diferencias de Fourier y métodos de mínimos cuadrados. Radiación de sincrotrón. Difracción de electrones y neutrones. Difracción en gases y líquidos.

A: Difractometría: Hitos históricos.

Texto principal:

- Estas transparencias estarán a vuestra disposición a través de nuestra página web y, si hay interés, podréis disponer de una copia impresa a dos transparencias por página en la biblioteca y en la fotocopidora.

Textos de consulta:

- V. Luaña, V. M. García Fernández, E. Francisco y J. M. Recio, *Espectroscopía Molecular*, (Universidad de Oviedo, 2002). ISBN: 84-8317-273-9. 269+x pag. 60 figs. 68 tablas.

Será nuestro libro de texto en el segundo cuatrimestre pero, además, el primer capítulo de esta asignatura se corresponde con el apéndice C. Hay varios ejemplares en la biblioteca.

Precio: 9.83 € (1636 pts.) (10% de descuento con el carnet universitario al comprar en la librería de la Universidad de la calle Argüelles).

- F. A. Cotton, *La teoría de grupos aplicada a la química* (Limusa, México, 1977), traducción de la segunda edición inglesa publicada por Wiley en 1971.
- M. Hamermesh, *Group theory and its application to physical problems*, republication of

the second (corrected) printing of the work first published by Addison-Wesley in 1962 ed. (Dover, New York, 1989).

- J. S. Lomont, *Applications of finite groups*, republication of the third printing of the work first published by Academic Press in 1959 ed. (Dover, New York, 1993).
- G. Burns and A. M. Glazer, *Space Groups for Solid State Scientists*, 2-nd ed. (Academic, San Diego, CA, 1990).
- C. Giacovazzo, H. L. Monaco, D. Viterbo, F. Scordari, G. Gilli, G. Zanotti and M. Catti, *Fundamentals of Crystallography*, (IUCr/Oxford, Oxford, 1992).
- D. E. Sands, *Introducción a la Cristalografía*, (Reverté, Barcelona, 1974).
- J. M. Amigó, J. L. Briansó, M. C. Briansó, R. Coy Yll, J. Solans, *Cristalografía*, (Rueda, Madrid, 1981).

Calendario del curso 2002-2003:

	Lu	Ma	Mi	Ju	Vi	Sa	Do	Lu	Ma	Mi	Ju	Vi	Sa	Do
Octubre		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27
	28	29	30	31										
Noviembre					1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
	25	26	27	28	29	30								
Diciembre						1	2	3	4	5	6	7	8	
	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
	23	24	25	26	27	28	29	30	31					

¡ 28 días \times 50' = 23.3 horas !