

---

**Materia: QUÍMICA Y ESTRUCTURA DEL ESTADO SÓLIDO**

---

Duración	Sesiones/semana	Carga semanal	Semestre
3 semanas	5	4 hrs	Segundo del año

Profesores que han impartido el curso: Dr. *Juan Carlos Rendón Angeles*.

**Propósitos:** El curso pretende dotar al estudiante de los conocimientos de cristalografía necesarios para entender la relación existente entre composición química, estructura cristalina y propiedades físicas en sólidos inorgánicos. Se hace particular énfasis en aspectos de la estructura de los átomos, el sistema periódico y las distintas fuerzas de cohesión presentes en sólidos cristalinos, y se continúa con la descripción de un cierto número de parámetros que ayudan a predecir la estabilidad y estructura de sólidos inorgánicos. Incluye además una descripción de algunas estructuras-tipo, de los grupos puntuales y espaciales de simetría y de los defectos más comunes en sólidos cristalinos para concluir con un tema enfocado a familiarizarse con la información que se obtiene de algunas técnicas básicas para el estudio de sólidos cristalinos como son difracción de rayos-X, de neutrones y de electrones.

**Contenidos:**

1 Introducción.

2 Conceptos fundamentales (Breve recordatorio): Modelo atómico de Bohr; Números cuánticos; Configuración electrónica; Tabla Periódica; Enlaces atómicos en sólidos (Fuerzas y energía de enlace).

3 Enlaces químicos.

- 3.1. Enlace iónico.
- 3.2. Enlace covalente.
- 3.3. Fuerzas de Van Der Waals y enlace metálico.

4 Estructura cristalina.

- 4.1. Introducción.
- 4.2. Modelo de las esferas empaçadas.

- 4.3. Celda unitaria.
  - 4.4. Sistemas cristalinos.
  - 4.5. Relaciones entre radios catión/anión.
- 5 Clasificación de estructuras cristalinas de acuerdo al número de coordinación.
- 5.1. Agrupamiento iónico y las reglas de Pauling.
  - 5.2. Compuestos A:X 1:1.
    - Estructura del NaCl.
    - Estructura del CsCl.
    - Estructura de ZnS.
  - 5.3. Compuestos A:X 1:2.  
Estructura de la CaF<sub>2</sub> (Fluorita).
  - 5.4. Compuestos A:X 2:3.  
Estructura del Corindón.
  - 5.5. Compuestos AB<sub>2</sub>X<sub>4</sub>  
Estructura de la Espinela
  - 5.6. Compuestos ABX<sub>3</sub>
  - 5.7. Silicatos.
  - 5.8. Estructura de los vidrios.
- 6 Análisis Estructural de los Sistemas Cristalinos.
- 6.1. Sistemas Cristalinos de Bravais.  
Definición de sistema cristalino.  
Notación de los sistemas cristalinos.
  - 6.2. Operaciones de simetría.  
Reflexión, Rotación, Inversión, Rotación-Inversión.
  - 6.3. Direcciones en la celda unitaria.
  - 6.4. Índices de Miller y planos cristalográficos.
  - 6.5. Grupos espaciales y puntuales.
- 7 Imperfecciones Estructurales en Sólidos Inorgánicos.
- 7.1. Clasificación de los defectos.
  - 7.2. Soluciones sólidas.
  - 7.3. Defectos de puntuales.
    - Defecto de tipo Frenkel.
    - Defecto de tipo Schottky.
    - Asociación de defectos.
  - 7.4. Estructura electrónica.
  - 7.5. Sólidos no estequiométricos.
  - 7.6. Defectos Lineales (Dislocaciones).
- 8 Métodos de análisis estructural.
- 8.1. Difracción de Rayos X.
  - 8.2. Difracción de electrones.
  - 8.3. Difracción de Neutrones.

Bibliografía recomendada:



1. INTERNATIONAL TABLES FOR CRYSTALLOGRAPHY, 5TH EDITION, Th. Hahn (Editor), Kluwer Academic Publishers, 2002.
2. CRYSTALLOGRAPHY AND CRYSTAL DEFECTS, A. Kelly and G. W. Groves, Longman Group Ltd., 1970.
3. AN INTRODUCTION TO CRYSTAL CHEMISTRY, R. C. Evans, Cambridge University Press, 1964.
4. STRUCTURAL INORGANIC CHEMISTRY, A. F. Wells, Oxford University Press, 1962.
5. BASIC CRYSTALLOGRAPHY, J. J. Rousseau, John Wiley and Sons, 1998.
6. STRUCTURE AND BONDING IN CRYSTALLINE MATERIALS, G. S. Rohrer, Cambridge University Press, 2001