

Programa de Cristal·lografia II curs 2006-07

⇒ Les parts que coincideixen amb el llibret de “Materials de Cristal·lografia” s’indiquen a la dreta

Els exercicis es troben o bé a “Materials de Cristal·lografia” (MC), o bé a les PRÀCTIQUES

1. CRISTAL·LOQUIMICA

Principals objectius:

Realitzar representacions tridimensionals d'estructures cristal·lines a partir de les dades estructurals amb el programa informàtic CaRIne, saber obtenir poliedres de coordinació i efectuar càlculs senzills.

PRÀCTICA 4

2. TEORIA RETICULAR

⇒ Capítol 5 (punt 6: Capítol 2)

Principals objectius:

1. Conèixer el reticle cristal·lí, encara que es tracti d'un objecte de dimensions manomètriques, en concret:
 - a): les relacions entre els plans reticulars, els índexs de Miller i els espaiats reticulars d_{hkl} . MC: pàg 65 i 66, PRÀCTICA 1
 - b): les relacions entre la xarxa recíproca i els plans reticulars. PRÀCTICA 2, MC: 5.2 i 5.1.
2. a): saber reconèixer la xarxa de Bravais d'una estructura cristal·lina a partir de les coordenades atòmiques. MC: 2.3 i 2.4., PRÀCTICA 3.
- b): en un anunciat de l'estructura cristal·lina tipus Taules Internacionals de Cristal·lografia, saber deduir la totalitat dels àtoms presents i les seves coordenades. MC: 2.5 i 2.6., PRÀCTICA 3

CLASSES DE TEORIA

1. Introducció: abstracció del medi cristal·lí; per a què la teoria reticular?.

2. Xarxa directa: cel·la; fileres reticulars i índex de Miller; plans reticulars, índexs de Miller i espaiat reticular; nocions de morfologia cristal·lina; volum de la cel·la fonamental.

3. Xarxa recíproca: definició; xarxa recíproca segons el sistema cristal·lí; relacions xarxa directe - xarxa recíproca; iteració de l'operació de reciprocitat; vector recíproc $\vec{r}_{hkl}^*$ i plans reticulars (hkl); mòdul de $\vec{r}_{hkl}^*$ i espaiat reticular d_{hkl} .

4*. Càlcul morfològic – cristal·logràfic

5*. Matriu mètrica

6. Les catorze xarxes de Bravais: xarxes primitives i xarxes múltiples; multiplicitat; tipus de xarxes i vectors de translació; les catorze xarxes de Bravais*

* hi ha la possibilitat que no es doni

3. SIMETRIA ESPACIAL

⇒ Capítol 4 (punt 3: parcialment)

Principals objectius:

1. Conèixer els elements de simetria espacial presents en els compostos cristal·lins, les seves nomenclatures i simbologies, i saber identificar-los en gràfics d'estructures cristal·lines. [PRÀCTICA 3, MC: pàg 44](#)
2. Saber usar les matrius de les operacions de simetria, pel cas d'elements de simetria d'ordre dos, per descriure les coordenades de les posicions atòmiques relacionades per simetria. [MC: 4.1, 4.2 i 4.3](#)
3. Comprendre en què consisteix un Grup Espacial de Simetria i saber deduir, a partir de la seva nomenclatura, el Grup Puntual al que pertany, la seva multiplicitat i l'orientació dels elements de simetria. [PRÀCTICA 5, MC: pàgines 53 a 58](#)
4. Maneig de les Taules Internacionals de Cristal·lografia, en el seu apartat de simetria espacial:
 - a): saber interpretar les representacions gràfiques i les posicions de Wyckoff
 - b): en el cas dels sistemes monoclínic i ròmbic, saber efectuar les representacions gràfiques a partir de la nomenclatura del grup espacial, i saber deduir les coordenades de les unitats asimètriques i els elements de simetria a partir d'aquestes. [PRÀCTICA 5, MC: pàgines 53 a 58](#)
5. Treball amb estructures reals:
 - a) saber projectar l'estructura cristal·lina d'un compost a partir de les dades de la cel·la i les posicions atòmiques, sobre paper i sense eines informàtiques, i mitjançant el programa cristal·logràfic CaRIne. [PRÀCTICA 6, PRÀCTICA 7](#)
 - b): a partir de la projecció d'una estructura ròmbica o monoclina, saber identificar i projectar la totalitat de la simetria espacial, i determinar el Grup Espacial. [PRÀCTICA 6, PRÀCTICA 7, PRÀCTICA 8](#)
 - c): en estructures ròmbiques o monoclíiques, saber determinar els elements de simetria espacial, la seva orientació i posició a la cel·la i el Grup Espacial a partir de les coordenades dels àtoms en posició general; saber identificar les posicions de Wyckoff ocupades pels diferents àtoms de l'estructura. [PRÀCTICA 6, PRÀCTICA 7, PRÀCTICA 8](#)

CLASSES DE TEORIA

1. Introducció: naturalesa i diferències amb la simetria puntual.

2. La simetria espacial: elements de simetria puntual i elements nous; la interacció entre simetria puntual i translació; la interacció que dona lloc a nous elements de simetria; la interacció que produeix la repetició dels elements de simetria; els eixos helicoidals: tipus, nomenclatura i símbols gràfics; els plans de lliscament: tipus, nomenclatura, i símbols gràfics segons l'orientació.

3. Els Grups Espacials de Simetria: introducció; obtenció a partir dels 32 grups puntuals i de les xarxes de Bravais: aplicació als Grups Espacials que es deriven del Grup Puntual 2/m; criteris de nomenclatura segons el sistema cristal·lí; multiplicitat dels Grups Espacials de Simetria; unitat asimètrica; representacions gràfiques de les Taules Internacionals de Simetria: aplicació als Grups Espacials que es deriven del Grup Puntual 2/m; subgrups; tipus de posicions i multiplicitat: posicions generals, posicions especials i posicions de Wyckoff; deducció dels elements de simetria a partir de les coordenades de les posicions generals, en el cas dels sistemes ròmbic i monoclínic.

4. DIFRACCIÓ DE RAIGS X⇒ **Capítol 6****Principals objectius:**

1. Conèixer la naturalesa dels raigs X i de la interacció amb els cristalls. [MC: 6.1 i 6.2](#)
2. Conèixer i saber utilitzar les lleis geomètriques fonamentals que regeixen la difracció dels raigs X, i saber efectuar càlculs senzills amb la fórmula fonamental que regeix les intensitats en els experiments de difracció. [MC: 6.3, 6.4, 6.6, 6.7, 6.11, 6.13, 6.16 i 6.17, PRÀCTICA 9 ?](#)
3. Conèixer els principals mètodes experimentals i les seves aplicacions a la caracterització de minerals i materials cristal·lins general. [MC: 6.15](#)
4. Ser capaç d'interpretar un diagrama de difracció de pols i d'usar el Powder Diffraction File en casos reals, i ser capaç de determinar el paràmetre cristal·lí a partir del diagrama de pols en el cas cúbic. [MC: 6.11, 6.13 i 6.14, PRÀCTICA 9 ?, possible visita al laboratori de difracció](#)
5. Ser capaç de simular el diagrama de difracció de pols d'un compost a partir de les seves dades estructurals amb el programa cristal·logràfic CaRIne. [PRÀCTICA 10](#)
6. Saber l'origen del fenomen anomenat “extincions sistemàtiques” i ser capaç d'utilitzar-les:
 - a) saber interpretar les lleis d'extinció sistemàtica enunciades a les Taules Internacionals de Cristal·lografia per a cada Grup Espacial, i a les taules de xarxes, plans de lliscament i eixos helicoidals. [MC: 6.18 i 6.19, PRÀCTICA 10](#)
 - b) saber aplicar les extincions sistemàtiques a la determinació d'un Grup Espacial a partir de dades d'experiments de difracció. [MC: 6.20 i 6.21](#)
 - c) saber preveure el diagrama de difracció de pols d'un compost a partir de les dades de la cel·la i el Grup Espacial: ordre d'aparició dels pics de difracció, pics absents per extinció sistemàtica, multiplicitat dels pics i intensitats relatives en casos senzills. [MC: 6.5, 6.8, 6.9, 6.10, 6.12 i 6.14, PRÀCTICA 10](#)

CLASSES DE TEORIA

1. Introducció: breu història de la difracció dels raigs X pels cristalls; conceptes d'interacció radiació electromagnètica – matèria: difusió, difusió inelàstica, difusió elàstica i difracció per un medi periòdic; camps d'aplicació; producció de raigs X per a difracció: tub de raigs X, espectre d'emissió i altres aparells

2. La geometria de la difracció: triangle de difracció; equacions de Laue i vector recíproc $\vec{r}_{hkl}^*$; l'esfera d'Ewald; la llei de Bragg.

3. La difracció de pols: aspectes fonamentals; geometria de la difractometria estàndard i orientació preferencial; el Powder Diffraction File per a la identificació de fases cristal·lines i aplicació a casos reals; altres aplicacions de la difracció de pols: determinació de paràmetres cristal·lins.

4. Altres mètodes de difracció: difractòmetre automàtic de monocristall; topografia de raigs X i microscòpia electrònica de transmissió (TEM); goniòmetre de textures.

5. Les intensitats dels experiments de difracció: el factor de difusió atòmica; el factor d'estructura F_{hkl} : la fórmula, l'exponencial complexa, la intensitat, el factor d'estructura en estructures centrosimètriques, la llei de Friedel; aplicació al càlcul de F_{hkl} en xarxes F, exemple de la Fluorita; extincions sistemàtiques: origen, deducció de la llei d'extinció sistemàtica per als sòlids cristal·lins amb xarxa F; taula d'extincions sistemàtiques per les xarxes; les extincions sistemàtiques per plans de lliscament i eixos helicoidals i les taules corresponents; les extincions sistemàtiques d'un grup espacial enunciades a les Taules Internacionals de Cristal·lografia; factors que intervenen en les intensitats de la difracció de pols: multiplicitats dels pics, orientació preferencial, factor de temperatura; previsió dels diagrames de difracció de pols d'estructures cúbiques senzilles: NaCl, KCl,...

Bibliografia

Materials de Cristal·lografia. Llicenciatura de Geologia. Enginyeria de Materials

EUGÈNIA ESTOP

Campus Virtual UAB

Cristal·lografia. Teoria Reticular, Grups Puntuals i Grups Espacials

SALVADOR GALÍ MEDINA, Edicions de la Universitat de Barcelona

Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

Cel·les, sistemes cristal·lins, projecció estereogràfica, simetria puntual, simetria espacial

♠ International Tables for Crystallography. Brief Teaching Edition of Volume A - Space-Group Symmetry

T. HAHN editor, Kluwer Academic Publishers

Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

Simetria espacial

Essentials of Crystallography

DUNCAN McKIE / CHRISTINE McKIE, Blackwell Scientific Publications

Cel·les, sistemes cristal·lins, projecció estereogràfica, simetria puntual, simetria espacial; Difracció de raigs X (extensa); Microscòpia electrònica (extensa)

Introduction à la Cristallographie et à la Chimie Structurale

M. VAN MEERSSCHE et J. FENEAU-DUPONT, Oyez

Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

Cel·les, sistemes cristal·lins, projecció estereogràfica, simetria puntual, simetria espacial; Difracció de raigs X (extensa); Cristal·loquímica; Cristall real (defectes, macles)

Crystallography

WALTER BORCHARDT-OTT, Springer Verlag

Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

Cel·les, sistemes cristal·lins, projecció estereogràfica, simetria puntual, simetria espacial; una mica de difracció de raigs X; Cristal·loquímica; Cristall real

Estructura atòmica y enlace químico

JAUME CASABÓ I GISPERT, Editorial Reverté

Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

Focalitzat en l'enllaç, conté també Cristal·loquímica (extensa) i una mica de defectes

Fundamentals of Crystallography

C. GIACOVAZZO et al., The International Union of Crystallography, Oxford Science Publications

Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

Nivell alt. Cel·les, sistemes cristal·lins, projecció estereogràfica, simetria puntual, simetria espacial; Difracció de raigs X (molt extensa); Cristal·loquímica; Defectes; Propietats físiques

Introduction to Mineral Science

A. PUTNIS, Cambridge University Press

Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

Complementari: llibre de mineralogia, amb introducció a la cristal·lografia, i que conté informació moderna en el camp del *cristall real*

Cristallografia

J.M. AMIGO, J.L. BRIANSO, M.C. BRIANSO, R. COY, J. SOLANS, Ed. Rueda

Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

An Introduction to Crystal Chemistry

Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

R.C. EVANS, Cambridge University Press

Llibre complementari: únicament cristal·loquímica