

Professors: Dr. Juan D. Martín i Dr. Joan F. Piniella

1. INTRODUCCIÓ

Breu història de la cristal·lografia. Definició i objectius de la cristal·lografia. Parts de la cristal·lografia. Relació amb altres ciències.

CRISTAL·LOGRAFIA GEOMÈTRICA

2. TEORIA RETICULAR

El medi cristal·lí. Propietats bàsiques i definidores del medi cristal·lí. Abstracció del medi cristal·lí. Xarxa directa (o real). Fileres reticulars. Plans reticulars. Índexs de Miller. Espaiat reticular. Densitats reticulars. Volum de la cel·la. Matriu mètrica. Xarxa recíproca (espai dual). Relacions entre la xarxa recíproca i la xarxa directa. Càlculs reticulars. Multiplicitat. Xarxes primitives i xarxes múltiples. Transformació de sistemes de referència.

3. MORFOLOGIA

Matèria monocristal·lina i policristal·lina. Lleis d'observació morfològica. Concepte de zona. Càlculs numèrics relacionats. Goniometria.

4. SIMETRIA PUNTUAL

Simetria finita i infinita. Operacions de simetria. Elements compostos de simetria. Teoremes de les operacions finites de simetria. Representació matricial d'operadors de simetria. Projecció estereogràfica. La simetria en un medi periòdic. Els grups puntuals. Deducció i representació. Notació de Hermann-Mauguin i notació de Schoenflies. Els set sistemes cristal·lins. Grups puntuals no cristal·logràfics. Simetria molecular.

5. XARXES CRISTAL·LINES

Introducció. Xarxes bidimensionals. Simetria puntual de les xarxes bidimensionals. Xarxes de Bravais. Simetria puntual de les xarxes de Bravais i relació amb els sistemes cristal·lins.

6. SIMETRIA ESPACIAL

Elements de simetria amb translació. Feixos d'elements de simetria. Grups espacials de simetria. Deducció. Notació. Multiplicitat. Posicions equivalents. Posicions generals i especials.

CRISTAL·LOGRAFIA DE RAIGS X

7. ELS RAIGS X

Producció de raigs X. Espectre continu i discontinu. Interacció dels raigs X amb la matèria.

8. DIFRACCIÓ DE RAIGS X

Condicions geomètriques de difracció. Equació de Laue, construcció d'Ewald, llei de Bragg. Intensitat de difracció. Extincions sistemàtiques. Llei de Friedel. Grups de Laue. Determinació del grup espacial de simetria.

9. DETERMINACIÓ DE L'ESTRUCTURA CRISTAL·LINA

Concepte de determinació d'estructura. Factor d'estructura i densitat electrònica. El problema de les fases. Utilitat de la determinació d'estructures cristal·lines. Bases de dades.

10. DIFRACCIÓ DE POLS

Introducció. La cambra Debye-Scherrer. El difractòmetre de pols. La difracció de pols com a tècnica analítica. El Powder Diffraction File.

11. FLUORESCÈNCIA DE RAIGS X

Base física. Camp d'aplicació. Anàlisi qualitativa i quantitativa.

BIBLIOGRAFIA

GALÍ, S.

Cristal·lografia. Teoria reticular, grups puntuals i grups espacials.
1a edició. PPU, 1993

BORCHARDT-OTT, W.

Crystallography
2a edició. Springer-Verlag, 1995

VAN MEERSSCHE, M. & FENEAU-DUPONT, J.

Introduction à la cristallographie et à la chimie structurale
3a edició. Peeters, 1984

GIACOVAZZO, C., MONACO, H.L., VITERBO, D., SCORDARI, F., GILLI, G., ZANOTTI, G.
& CATTI, M.

Fundamentals of crystallography. IUCR texts on crystallography 2
2a edició. Oxford University Press, 2002

AMORÓS, J.L.

El cristal. Morfología, estructura y propiedades físicas
4a edició. Atlas, 1990

ADRECES ELECTRÒNIQUES D'INTERÈS

La web de cristal·lografia, de Màrius Vendrell, professor de la UB

http://161.116.85.21/crista/index_cat.htm

Curs de cristal·lografia de la UNED

<http://www.uned.es/cristamine/inicio.htm>

Departament de Cristal·lografia del Instituto de Química-Física Rocasolano del CSIC

<http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/index2.html>

KALI, programa per fer dibuixos periòdics bidimensionals

<http://www11.uniovi.es/ngec/>

MINCRYST, base de dades de minerals, amb les estructures cristal·lines, entre altres dades

<http://database.iem.ac.ru/mincryst/>

Morfologia cristal·lina, simetria, sistemes...

<http://webmineral.com/crystall.shtml>