

Cristalografía

2013/2014

Código: 101059

Créditos: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2500254 Geología	OB	1	2

#### Profesor de contacto

Nombre: Eugenia Estop Graells

Correo electrónico: [Eugenia.Estop@uab.cat](mailto:Eugenia.Estop@uab.cat)

#### Utilización de idiomas

Lengua vehicular mayoritaria: catalán (cat)

Algún grupo integro en inglés: no

Algún grupo integro en catalán: sí

Algún grupo integro en español: no

#### Prerrequisitos

Esta asignatura no tiene prerrequisitos establecidos para ser cursada.

De todos modos, hay que recordar y si es necesario repasar los conocimientos adquiridos antes de empezar la carrera y durante el primer semestre de la carrera, en Matemáticas, Física y Química.

En particular, hay que recordar y saber aplicar lo aprendido en:

- Formulación Química
- Valencia y tipo de enlace entre átomos
- Cálculo matricial
- Cálculo vectorial

Por otra parte, cabe destacar que el aprendizaje y el uso de la Cristalografía requieren esfuerzo, concentración y trabajo.

#### Objetivos

Se trata de una asignatura básica de primer curso, con aplicaciones directas a la Mineralogía de segundo curso y posteriormente a la Petrología y otras materias.

En consecuencia, los objetivos son:

I. Adquirir un conocimiento básico sobre:

1 - el retículo cristalino y su descripción matemática, como base para la descripción de las estructuras cristalinas de los minerales

2 - la simetría cristalina y su descripción matemática, como base para la descripción de las estructuras cristalinas de los minerales

II. Conocer las bases necesarias de la difracción de los rayos X por cristales, para poder aplicar esta técnica en la asignatura de Mineralogía de segundo curso.

III. Adquirir visión espacial de las estructuras cristalinas y su simetría

IV. Saber efectuar tareas sencillas con software propio de la Cristalografía

V. Tener las bases para poder relacionar las propiedades físicas de la materia con su estructura

### **Competencias**

- Aprender y aplicar en la práctica los conocimientos adquiridos y resolver problemas.
- Relacionar las propiedades físicas de la materia con su estructura.
- Trabajar con autonomía.

### **Resultado de aprendizaje**

1. Aprender y aplicar en la práctica los conocimientos adquiridos y resolver problemas.
2. Relacionar las propiedades físicas de la materia con su estructura.
3. Trabajar con autonomía.

### **Contenidos**

#### **I. Introducción**

Breve historia de la Cristalografía. Estados de la materia. “El cristal por fuera y el cristal por dentro”. Objetivos de la Cristalografía. Relación con otras ciencias.

Bibliografía, páginas web

#### **II. Teoría Reticular I**

Materia y estructura cristalina. Triple periodicidad. Celda fundamental. Los 7 tipos de celdas. Volumen de la celda.

Vectores de traslación. Nudos. Retículo. Abstracción del medio cristalino.

Propiedades de la materia cristalina: periodicidad, homogeneidad, anisotropía, simetría.

Red Directa (o real). Retículo cristalino. Filas reticulares, índice de Miller [uvw]. Planes reticulares, índice de Miller (hkl), espaciado reticular.

Densidades reticulares: de una fila, de un plano. Relación con las aristas y las caras de los cristales.

Las 14 redes (retículos) de Bravais. Celdas primitivas y celdas múltiples.

Matriz métrica. Aplicación al cálculo del producto escalar: módulo de un vector, distancia entre dos puntos de la celda.

#### **III. Morfología Cristalina**

Materia policristalina y materia monocristalina, poliedros cristalinos.

Las leyes de observación: la ley de la constancia de los ángulos, la ley de Haüy, la ley de simetría .

Proyección estereográfica de los poliedros cristalinos

#### IV. Simetría Puntual

Definición. Relacionada con la morfología cristalina pero también con el retículo. Elementos y operaciones de simetría.

Tipos de operaciones: rotaciones, reflexiones e inversiones. Expresión matemática de las operaciones de simetría más sencillas. Rotaciones posibles en el medio cristalino. Combinación de operaciones de simetría.

Tipos de elementos de simetría: ejes de rotación, plano de reflexión, centro de inversión y ejes de rotación -inversión.

Nomenclatura, orden (multiplicidad), símbolo gráfico y proyección estereográfica de los diferentes elementos de simetría puntual.

Definición de grupo puntual de simetría. Proyección estereográfica de los grupos puntuales. Combinación de elementos de simetría.

Los 32 grupos puntuales de simetría y su nomenclatura. Clasificación de los grupos puntuales en 7 Sistemas Cristalinos. Relación Sistemas Cristalinos - celdas fundamentales.

Multiplicidad de los Grupos Puntuales. Tipo de posiciones: generales y especiales. Formas cristalinas. Estudio de la simetría de poliedros cristalinos ideales.

#### V. Simetría Espacial

Definición. Interacción traslación - simetría puntual. Repetición de los elementos de simetría. Nuevos elementos de simetría: ejes helicoidales y planos de deslizamiento.

Ejes helicoidales. Los once tipos de ejes helicoidales: nomenclatura, orden , símbolo gráfico y proyección ortogonal.

Ejemplos en estructuras cristalinas reales.

Planes de deslizamiento. Nomenclatura, orden, símbolo gráfico y proyección ortogonal de los principales tipos de planos de deslizamiento. Ejemplos en estructuras cristalinas reales.

La simetría espacial como diversificación de la simetría puntual.

Los grupos espaciales de simetría. Obtención de los grupos espaciales; ejemplo: grupos espaciales derivados del grupo puntual 2.

Nomenclatura y multiplicidad de los grupos espaciales: relación con la nomenclatura y multiplicidad de los grupos puntuales. Ejemplos.

Representación gráfica de los grupos espaciales. Ejemplo de los grupos espaciales derivados del grupo puntual 2. Otros ejemplos. Posiciones generales y posiciones especiales. La simetría espacial en las Tablas Internacionales de Cristalografía.

Estudio de la simetría espacial de estructuras cristalinas reales.

#### VI. Teoría Reticular II y Difracción de Rayos X

Nociones sobre la Red Recíproca. Vectores recíprocos perpendiculares a los planos reticulares (hkl). Cálculo del espaciado reticular.

Introducción a la Difracción de Rayos X por los cristales : un fenómeno de interferencias constructivas de gran capacidad y precisión; interacción con los electrones de los cristales . Obtención de los rayos X para experimentos de Cristalografía. La radiación  $K_{\alpha}$

La difracción y la red recíproca.

La geometría de la difracción depende del retículo: triángulo de difracción , ecuaciones de Laue , ley de Bragg , esfera de Ewald .

La intensidad de la difracción depende del contenido químico y la distribución de los átomos.

¿Qué pasa cuando hay poca cristalinidad : temperatura , desorden , cristales muy pequeños ( manométricos ) .

Aparatos para los experimentos de difracción. La difracción de polvo. La orientación preferencial de la muestra.

La intensidad de la difracción también depende de la simetría del sólido cristalino: extinciones sistemáticas; multiplicidad de los picos en difracción de polos. Determinación del grupo espacial.

El Powder Diffraction File. Aplicaciones en Geología. Ejemplos.

SESIONES DE PRÁCTICAS (el orden de las prácticas puede cambiar, principalmente las que se realizan en el aula de informática)

<b>Práctica I</b>	Proyección de estructuras
<b>Práctica II</b>	Filas y planos reticulares
<b>Práctica II</b>	Apilamientos compactos
<b>Práctica IV</b>	Matriz métrica y aplicaciones
<b>Práctica V</b>	Simetría puntual
<b>Práctica VI Informática</b>	Simetría puntual: poliedros con Adobe 3D
<b>Práctica VII</b>	Simetría puntual
<b>Práctica VIII Informática</b>	Estructuras con el CaRIne
<b>Práctica IX</b>	Simetría espacial
<b>Práctica X</b>	Simetría espacial
<b>Práctica XI</b>	Difracción de Rayos X

### Metodología

Las clases de teoría se desarrollan como sesiones clásicas con explicaciones del profesor, preguntas y discusiones con los estudiantes y resolución de ejercicios y problemas.

Las sesiones de prácticas se desarrollan por grupos (previsiblemente 4) , en un espacio de mesas amplias donde los estudiantes pueden trabajar fácilmente en equipo; algunas de las sesiones prácticas se realizan en el aula de informática. Los estudiantes disponen de un guion del trabajo que deben desarrollar. El profesor ayuda, resuelve dudas en grupo o personalmente, y da el resultado correcto de la práctica, ya sea en la misma aula , o al campus virtual de la asignatura .

El trabajo autónomo del estudiante consiste en trabajar él personalmente todos los aspectos planteados en el aula, tanto en las clases de teoría como las sesiones prácticas, por lo que dispone de apuntes de clase , de material de consulta , de la bibliografía y de los ejercicios / prácticas. Sin este trabajo personal no es posible acceder al conocimiento de la Cristalografía y superar la asignatura. También se insiste en la conveniencia de asistir a todas las clases (teoría y prácticas), ya que no es fácil iniciarse en la materia sin la orientación y la pauta que el profesor da en clase.

Se realizarán controles de asistencia a clase: teoría serán controles aleatorios y prácticas se harán controles sistemáticos.

El Campus Virtual se utiliza como medio de comunicación con el alumno, pero en ningún caso SUSTITUYE LA PRESENCIA EN CLASE

### Actividades formativas

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
<b>Tipos: dirigidas</b>			
<b>Clases practicas</b>	25	1	1, 2, 3
<b>Clases de teoría</b>	26	1,04	2
<b>Tipos: autónomas</b>			
<b>Trabajo autónomo</b>	91,5	3,66	1, 2, 3

### Evaluación

La evaluación de la asignatura se realizará a partir de tres exámenes parciales. Los dos primeros parciales se harán durante el curso y se prevé que contengan más materia que el tercer parcial.

El tercer parcial se hará coincidir con el examen final, que es el único organizado a nivel de fecha, horario y aula por la facultad. Se prevé que el tercer parcial contenga poca materia, pero en cambio se puede pedir alguna cuestión global de toda la asignatura. Este tercer parcial será obligatorio para todos. En la misma sesión de examen final se podrán recuperar los dos primeros parciales suspendidos (nota inferior a 5).

La calificación global de la asignatura será el promedio de las calificaciones obtenidas en los tres parciales según el peso de cada uno de ellos, teniendo en cuenta que un parcial con nota inferior a 3,5 no hará promedio y por tanto implicará suspender la asignatura.

### Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
<b>Examen final: Parcial 3 + recuperación Parcial 1 + recuperación Parcial 2</b>	Parcial 3: mínimo 10, máximo 35	3,5	3,5	1, 2, 3
<b>Parcial 1</b>	Mínimo 20, máximo 60	2	2	1, 2, 3
<b>Parcial 2</b>	Mínimo 20, máximo 60	2	2	1, 2, 3

### Bibliografía

Cristalografía. Teoría Reticular, Grupos Puntuales y Grupos espaciales

- SALVADOR GALÍ MEDINA, Edicions de la Universitat de Barcelona

Celdas, sistemas cristalinos, proyección estereográfica, simetría puntual, simetría espacial.

- International Tables for Crystallography. Volume A: Space-Group Symmetry (teaching edition)

T. HAHN, editor, The International Union of Crystallography, D. Reidel Publishing Company

Simetría especial

- Introduction à la Cristallographie et à la Chimie Structurale M. VAN MEERSSCHE et J. FENEAU-DUPONT, Oyez

Celdas, sistemas cristalinos, proyección estereográfica, simetría puntual, simetría espacial ; difracción de rayos X (extensa) ; Cristaloquímica ; Defectos (incluyendo maclas)

- • An Introduction to Crystal Chemistry R.C. EVANS, Cambridge University Press

Cristaloquímica básica

- • Estructura atómica y enlace químico. JAUME CASABÓ I GISPERT, Editorial Reverté

Centrado en el enlace, contiene también cristaloquímica (extensa) y algo de defectos.

- Introduction to Mineral Science A. Putna, Cambridge University Press

Complementario: libro de mineralogía, con introducción a la cristalografía, y que contiene información moderna en el campo de las técnicas y los defectos

- Crystallography WALTER Borchardt-OTT, Springer Verlag

Celdas, sistemas cristalinos, proyección estereográfica, simetría puntual, simetría espacial; un poco de difracción de rayos X; cristaloquímica; Defectos.

Páginas web

<http://www.iucr.org> International Union of Crystallography

<http://www.iucr.org/education/pamphlets> Teaching pamphlets

[http://reference.iucr.org/dictionary/Main\\_Page](http://reference.iucr.org/dictionary/Main_Page) Dictionari de cristal·lografia

<http://it.iucr.org/> International Tables for Crystallography, accés només al campus

<http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/> Instituto de Química Física Rocasolano

<http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php> American Mineralogist Crystal Structure Database

<http://www.univ-lemans.fr/enseignements/physique/02/cristallo/cristal.html>

<http://pros.orange.fr/carine.crystallography/>

Universidad de Cambridge:

<http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/atomic-scale-structure/single1.php>

<http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/stereographic/index.php>

[http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/miller\\_indices/index.php](http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/miller_indices/index.php)

<http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/xray-diffraction/index.php>

[http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/crystallographic\\_texture/texture\\_measurement.php](http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/crystallographic_texture/texture_measurement.php)