

28217 CRISTAL·LOGRAFIA

- Tipus d'assignatura: Troncal
- Crèdits: 6 (Teòrics: 3, problemes: 1.5, pràctics laboratori: 1.5)
- Departament responsable: Geologia
- Semestre: primer
- Tutories: hores convingudes amb els alumnes

• OBJECTIUS DOCENTS

El curs s'ha centrat fonamentalment en dos aspectes: el primer ha estat el d'adquirir un coneixement bàsic que permeti, més endavant, comprendre l'estructura, les propietats dels diferents materials cristal·lins i treure profit dels mètodes i tècniques de caracterització cristal·logràfica; aquest coneixement bàsic ha consistit en la descripció matemàtica del reticle cristal·lí i en l'estudi de la simetria cristal·lina. El segon dels aspectes ha sigut el d'introduir l'alumne en la difracció dels raigs X pels cristalls amb l'objectiu de poder desenvolupar, posteriorment, en l'assignatura de caracterització, el conjunt de tècniques de difracció tant potents per a la caracterització estructural i microestructural dels materials.

L'assignatura queda limitada a aquests aspectes pel pla d'estudis de la titulació.

• CONTINGUTS

1. TEORIA RETICULAR

- 1.1 El medi cristal·lí com un reticle periòdic: nusos-vectors de translació; cel·la fonamental; fileres reticulars: index de Miller, densitat; plans reticulars: index de Miller, seqüència, densitat; llei de la constància dels angles; càlcul morfològic-cristal·logràfic.
- 1.2 Xarxa recíproca: dues definicions; vectors de translació; iteració; relacions amb la xarxa directe: volum cel·la fonamental, vector recíproc perpendicular als plans, vector directe perpendicular als plans.
- 1.3 Les catorze xarxes de Bravais: els set tipus de cel·les, matriu mètrica; cel·les primitives i múltiples, nusos i vectors addicionals; els set sistemes cristal·lins; canvi de sistema de referència.

Exercicis

2. SIMETRIA PUNTUAL

- 2.1 Representació de la simetria puntual: la projecció estereogràfica.
- 2.2 Operacions de simetria puntual: rotacions, inversió, reflexió, rotació-inversió; elements de simetria: ordre, representació gràfica.
- 2.3 Grups Puntuals de Simetria: estructura de grup; nomenclatura per sistemes cristal·lins; representació gràfica; multiplicitat; posicions generals i posicions especials.

Exercicis

3. SIMETRIA ESPACIAL

- 3.1 Interacció translació-simetria: operacions de simetria amb translació, eixos helicoidals, plans de lliscament; feixos d'elements de simetria.

3.2 Grups Espacials de Simetria: estructura de grup; nomenclatura per sistemes cristal·lins; representació gràfica; coordenades de la unitat asimètrica; multiplicitat; posicions generals i posicions espacials.

Exercicis

4. DIFRACCIÓ DELS RAIGS X PELS CRISTALLS

4.1. Introducció: descobriment i aplicacions de la difracció; radiació electromagnètica; obtenció de raigs X: tubs clàssics, ànode rotatori, sincrotró.

4.2. Geometria de la difracció: triangle de difracció; vector de difusió; equacions de Laue; plans reticulars en la difracció; llei de Bragg; esfera d'Ewald.

4.3. Factor d'estructura: amplitud de les ones difoses per un cristall; factor de difusió atòmica; càlcul del factor d'estructura.

4.4 Extincions Sistemàtiques

4.5 Introducció a la difracció de pols: esfera d'Ewald, conus de difracció; difractòmetre de pols standard: orientació preferencial; aplicacions de la difracció de pols: identificació (fitxes PDF); textura; determinació de paràmetres cristal·lins.

Exercicis

- PROBLEMES:

Donat que no hi havia diferenciació d'horari entre les classes de teoria i problemes (sessions conjuntes d'hora i mitja), s'han anat desenvolupant i resolent una sèrie d'exercicis o problemes a classe; a més, es varen entregar problemes complementaris a resoldre per part dels alumnes, que es corregien en les sessions de tutories.

- PRACTIQUES

S'han dut a terme 4 pràctiques en 6 sessions de tres hores cadascuna:

1. Simetria Puntual: estudi dels diferents elements de simetria puntual, els grups puntuals de simetria i la seva projecció estereogràfica; s'han utilitzat models de formes cristal·lins, de fusta.

Lloc: aula C2/-157 (3 sessions).

2. Introducció al programa CaRine Crystallography: radis iònics i atòmics; coordinació; representació de diverses estructures cristal·lins.

Lloc: aula d'informàtica de l'ETSE (1 sessió).

3. Estudi de les dues estructures de la perovskita BaTiO_3 : cúbica: representació de l'estructura, coordinació; tetragonal: representació, determinació del grup espacial; comparació de les dues estructures. Relacions ferroelectricitat-estructura. Simulació del diagrama de difracció de pols de les dues fases i comparació. Estudi de la perovskita CaTiO_3 .

Ús del programa CaRine i de les fitxes del Powder Diffraction File.

Lloc: aula d'informàtica de l'ETSE (1 sessió).

4. Difracció de pols d'estructures simples: NaCl , KCl , CsCl , ZnCl ; càlcul del factor d'estructura; deducció de les extincions sistemàtiques; multiplicitat de les reflexions. Comparació dels càlculs amb els diagrames de difracció simulats (CaRine). Lloc: aula d'informàtica de l'ETSE (1 sessió).

- AVALUACIÓ

S'ha realitzat un exàmen eminentment pràctic, sobre els diferents aspectes desenvolupats a l'assignatura: càlcul cristal·logràfic, simetria puntual i espacial i difracció de raigs X. L'exàmen es va dur a terme al seminari A (no a l'aula d'informàtica). L'avaluació s'ha fet en base als resultats obtinguts a l'exàmen.

- BIBLIOGRAFIA

Cristal·lografia. Teoria Reticular, Grups Puntuals i Grups Espacials
SALVADOR GALÍ MEDINA, Edicions de la Universitat de Barcelona
Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

International Tables for Crystallography. Volume A: Space-Group Symmetry (teaching edition)
T. HAHN, editor, The International Union of Crystallography, D. Reidel Publishing Company
Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

Essentials of Crystallography
DUNCAN McKIE / CHRISTINE McKIE, Blackwell Scientific Publications

Introduction à la Cristallographie et à la Chimie Structurale
M. VAN MEERSSCHE et J. FENEAU-DUPONT, Oyez
Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

Introducción a los métodos de Cristalografía Óptica
F. D. BLOSS, Ediciones Omega
Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

Crystallography
WALTER BORCHARDT-OTT, Springer Verlag
Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

Estructura atómica y enlace químico
JAUME CASABÓ I GISPERT, Editorial Reverté
Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

Fundamentals of Crystallography
C. GIACOVAZZO et al., The International Union of Crystallography, Oxford Science Publications
Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE