

## Guia docent de l'assignatura "Cristal·lografia"

2011/2012

Codi: 101059  
Crèdits ECTS: 6

Titulació	Pla	Tipus	Curs	Semestre
2500254 Geologia	817 Graduat en Geologia	OB	1	2

### Contacte

Nom : Eugenia Estop Graells  
Email : Eugenia.Estop@uab.cat

### Utilització d'idiomes

Llengua vehicular majoritària: català (cat)  
Algun grup íntegre en anglès: No  
Algun grup íntegre en català: Sí  
Algun grup íntegre en espanyol: No

### Prerequisits

Aquesta assignatura no té Prerequisits establerts per a ser cursada.

De tota manera, cal recordar i si cal repassar, els coneixements adquirits abans de començar la carrera i durant el primer semestre de la carrera, en Matemàtiques, Física i Química.

Més en particular, cal recordar i saber aplicar lo après en:

- Formulació Química
- València i tipus d'enllaç entre àtoms
- Càlcul matricial
- Càlcul vectorial

D'altra banda, cal destacar que l'aprenentatge i l'ús de la Cristal·lografia requereixen esforç, concentració i treball.

### Objectius i contextualització

Es tracta d'una assignatura bàsica de primer curs, amb aplicacions directes a la Mineralogia de segon curs.

En conseqüència, els objectius són:

I. Adquirir un coneixement bàsic sobre:

1 - el reticle cristal·lí i la seva descripció matemàtica, com a base per a la descripció de les estructures cristal·lines dels minerals

2 - la simetria cristal·lina i la seva descripció matemàtica, com a base per a la descripció de les estructures cristal·lines dels minerals

II. Conèixer les bases necessàries de la difracció dels Raigs X pels cristalls, per a poder aplicar aquesta tècnica en l'assignatura de Mineralogia de segon curs.

- III. Adquirir visió espacial de les estructures cristal·lines i la seva simetria
- IV. Saber efectuar tasques senzilles amb software propi de la Cristal·lografia
- V. Tenir les bases per a poder relacionar les propietats físiques de la matèria amb la seva estructura

## Competències i resultats d'aprenentatge

### **1312:E02 - Relacionar les propietats físiques de la matèria amb la seva estructura.**

1312:E02.00 - Relacionar les propietats físiques de la matèria amb la seva estructura.

### **1312:T02 - Aprendre i aplicar a la pràctica els coneixements adquirits i resoldre problemes.**

1312:T02.00 - Aprendre i aplicar a la pràctica els coneixements adquirits i resoldre problemes.

### **1312:T04 - Treballar amb autonomia.**

1312:T04.00 - Treballar amb autonomia.

### **1312:T09 - Demostrar interès per la qualitat i la praxi de la qualitat.**

1312:T09.00 - Demostrar interès per la qualitat i la praxi de la qualitat.

## Continguts

### **1. INTRODUCCIÓ**

1.1. Cristal·lografia

1.2. Estructura Cristal·lina: cel·la elemental

Propietats de la Matèria Cristal·lina

- Exemples

### **2. SISTEMES CRISTAL·LINS. LES XARXES - les simetries i les cel·les**

2.1. Cel·la elemental

2.2. Sistemes cristal·lins: definició per cel·la elemental

- Observació de models de les cel·les

### **3. SIMETRIA PUNTUAL**

Introducció

3.1. Elements de simetria

EIXOS DE ROTACIÓ: definició; angles de rotació compatibles amb el medi cristal·lí

PLA DE SIMETRIA: definició

CENTRE DE SIMETRIA: definició

EIXOS DE ROTACIÓ-INVERSIÓ: definició

3.2. Grups Puntuals de Simetria; nomenclatura; multiplicitat.

3.3. Projectió Estereogràfica.

3.4. Sistemes cristal·lins i Grups Puntuals en projectió estereogràfica

- Exemples i exercicis

3.5. Operacions de simetria *aquest apartat potser es farà en iniciar el Capítol 6*

3.5.1. Tipus: pròpies i impròpies

3.5.2. Definició matricial de les operacions de simetria

- Exercicis

**C1, C2, C3:** 3 sessions pràctiques sobre **simetria puntual dels sòlids cristal·lins**: observació de models cristal·logràfics, determinació del grup puntual, projecció i indexació de cares, anàlisi de formes cristal·lines.

## 4. LES XARXES

2.3. Les xarxes

2.3.1. Reticle o xarxa

2.3.2. Tipus de xarxes

2.3.3. Les catorze xarxes de Bravais

- Exemples i exercicis

## 5. TEORIA RETICULAR

5.1. Introducció: abstracció del medi cristal·lí, nusos, per a què la teoria reticular

5.2. Xarxa directa (XD): fileres reticulars-índexs de Miller [uvw]-densitat, plans reticulars-índexs de Miller (hkl)-densitat, nocions de morfologia cristal·lina, volum de la cel·la elemental

- Exercicis

5.3. Xarxa recíproca (XR): base **i, j, k**, i base cristal·logràfica; definició de XR; perpendicularitat entre vectors de la XD i vectors de la XR; xarxa recíproca de cel·les ortogonals; producte mixt entre tres vectors; productes escalars entre vectors de les dues xarxes; relacions XD-XR: perpendicularitat entre vectors  $\mathbf{r}_{hkl}^*$  de la XR i plans reticulars (hkl) de la XD; espaïat reticular  $d_{hkl}$

- Exercicis

5.4. Càlcul morfològic i cristal·logràfic: aresta [uvw] paral·lela a una cara (hkl); aresta [uvw] determinada per dues cares (hkl) i (h'k'l'); cara (hkl) determinada per dues arestes [uvw] i [u'v'w']; tres cares en zona; angle entre cara (hkl) i aresta [uvw]

- Exercicis

5.5. Matriu mètrica: aplicació a l'obtenció del mòdul d'un vector i al càlcul de les distàncies interatòmiques

- Exercicis

**C4:** 1 sessió pràctica de càlculs de teoria reticular

## 6. SIMETRIA ESPACIAL

6.1. Introducció: simetria puntual i espacial; Grups Espacials de Simetria; nomenclatura; multiplicitat

6.2. La simetria espacial

4.2.1. Interacció translació i simetria puntual:

a. Formació de noves operacions i nous elements de simetria: EIXOS HELICOIDALS i PLANS DE

LLISCAMENT; translació **T** i translació **t**

b. Repetició dels elements de simetria a l'espai

6.2.2. EIXOS HELICOIDALS: deducció dels diferents tipus; eixos helicoidals que delaten quiralitat; nomenclatura i símbols gràfics; exemple del quarz; eixos binaris paral·lels al pla de projecció

- Exemples i exercicis

6.2.3 PLANS DE LLISCAMENT: axials, diagonals, diamant; símbols gràfics i tipus de representacions gràfiques

- Exemples i exercicis

Taules Internacionals de Cristal·lografia: representacions dels grups espacials

- Exemples i exercicis

**C5, C6, C7:** 3 sessions pràctiques de simetria espacial, treballant sobre estructures cristal·lines reals, i utilitzant software cristal·logràfic

## 7. DIFRACCIÓ DE RAIGS X

7.1. Introducció i producció de raigs X: breu història, camps d'aplicació de la difracció, tub de raigs X, espectre d'emissió, sincrotró

7.2. La llei de Bragg

7.2.1. Triangle de difracció: vector de difusió

7.2.2. Equacions de Laue: vector de difusió **H** i vector recíproc  $\mathbf{r}_{hkl}^*$ ; paper dels plans reticulars en la difracció

7.2.3 Esfera d'Ewald: nombre màxim de reflexions

7.2.4. Llei de Bragg: paper dels plans reticulars en la difracció

- Exercicis

7.3. La difracció de pols

7.3.1. La difracció de pols: conus de difracció

7.3.2. Difractometria estàndard -2 de mostra plana: orientació preferencial

7.3.3. El Powder Diffraction File i la identificació de fases cristal·lines

- Exemples i exercicis

**C8 i C9:** 2 sessions pràctiques sobre **difracció de raigs X i tècnica de pols** on es generaran, mitjançant el programa cristal·logràfic CaRIne, diagrames de difracció de pols de diferents tipus de materials cristal·lins; ús del Powder Diffraction File

## Metodologia

Les classes de teoria es desenvolupen com a sessions clàssiques amb explicacions del professor, preguntes i discussions amb els estudiants i resolució d'exercicis i problemes.

Les sessions de pràctiques es desenvolupen per grups (previsiblement 3), en un espai de taules amplies on els estudiants poden treballar fàcilment en equip; algunes de les sessions pràctiques es realitzen a l'aula

d'informàtica. Els estudiants disposen d'un guió del treball que han d'efectuar. El professor ajuda, resol dubtes en grup o personalment, i dóna el resultat correcte de la pràctica, ja sigui en la mateixa aula, o al campus virtual de l'assignatura.

El treball autònom de l'estudiant consisteix en treballar ell personalment tots els aspectes plantejats a l'aula, principalment a les classes de teoria; per això disposa del apunts de classe, de la bibliografia i dels exercicis resolts. Sense aquest treball personal no és possible accedir al coneixement de la Cristal·lografia.

## Activitats formatives

Activitat	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
<b>Tipus: Dirigides</b>			
Classes de pràctiques	28	1,12	1312:E02.00 , 1312:T09.00 , 1312:T04.00 , 1312:T02.00
Classes de teoria	25	1	1312:E02.00 , 1312:T09.00
<b>Tipus: Supervisades</b>			
Presentació de treballs en grup	5	0,2	1312:E02.00 , 1312:T02.00 , 1312:T04.00 , 1312:T09.00
<b>Tipus: Autònomes</b>			
Treball Autònom	82	3,28	1312:E02.00 , 1312:T04.00 , 1312:T09.00 , 1312:T02.00

## Avaluació

A mitjan semestre s'efectua una avaluació amb l'objectiu d'acostumar l'estudiant a treballar personalment la matèria durant tot el semestre. També serveix per conèixer el tipus d'avaluació global que es fa al final del semestre.

S'avaluaran els treballs presentats i les respostes a les preguntes del professor i dels altres companys.

L'avaluació global equival a l'exàmen final.

Si un alumne es presenta a un parcial i a la presentació de treballs, ja no podrà tenir opció a la qüalificació de "no presentat", donat que la suma de les dues activitats supera el 35% de l'avaluació de l'assignatura

## Activitats d'avaluació

Activitat	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Avaluació global	48	3	0,12	1312:E02.00 , 1312:T02.00 , 1312:T09.00 , 1312:T04.00
Parcial 1	16	1	0,04	1312:E02.00 , 1312:T02.00 , 1312:T04.00 , 1312:T09.00
Parcial 2	16	1	0,04	1312:E02.00 , 1312:T09.00 , 1312:T04.00 , 1312:T02.00
Presentació de treballs	20	5	0,2	1312:E02.00 , 1312:T02.00 , 1312:T04.00 , 1312:T09.00

## 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

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

• **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

Simetria espacial.

• **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; Defectes (incloent macles).

• **An Introduction to Crystal Chemistry**

R.C. EVANS, Cambridge University Press

Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

Cristal·loquímica, bàsic

• **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.

• **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 de les tècniques i els defectes

• **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; Defectes.

**Pàgines 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) Diccionari 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/>

Universitat 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)