

**Cristal·lografia****2012/2013**

Codi: 101059

Crèdits ECTS: 6

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

**Professor de contacte**

Nom: Eugenia Estop Graells

Correu electrònic: 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**

Es tracta d'una assignatura bàsica de primer curs, amb aplicacions directes a la Mineralogia de segon curs i posteriorment a la Petrologia i altres matèries.

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

- Aprendre i aplicar a la pràctica els coneixements adquirits i resoldre problemes.
- Relacionar les propietats físiques de la matèria amb la seva estructura.
- Treballar amb autonomia.

## Resultats d'aprenentatge

1. Aprendre i aplicar a la pràctica els coneixements adquirits i resoldre problemes.
2. Relacionar les propietats físiques de la matèria amb la seva estructura.
3. Treballar amb autonomia.

## Continguts

### I. Introducció

Breu història de la Cristal·lografia. Estats de la matèria. "El cristall per fora i el cristall per dintre". Objectius de la Cristal·lografia. Relació amb altres ciències.

Bibliografia, pàgines web

### II. Teoria Reticular I

Matèria i estructura cristal·lina. Triple periodicitat. Cel·la fonamental. Els 7 tipus de cel·les. Volum de la cel·la.

Vectors de translació. Nusos. Reticle. Abstracció del medi cristal·lí.

Propietats de la matèria cristal·lina: periodicitat, homogeneïtat, anisotropia, simetria.

Xarxa Directa (o real). Reticle cristal·lí. Fileres reticulars, índex de Miller [uvw]. Plans reticulars, índex de Miller (hkl), espaiat reticular.

Densitats reticulars: d'una filera, d'un pla. Relació amb les arestes i les cares dels cristalls.

Les 14 xarxes (reticles) de Bravais. Cel·les primitives i cel·les múltiples.

Matriu mètrica. Aplicació al càlcul del producte escalar: mòdul d'un vector, distància entre dos punts de la cel·la.

### III. Morfologia Cristal·lina

Matèria policristal·lina i matèria monocristal·lina, poliedres cristal·lins.

Les lleis d'observació: la llei de la constància dels angles, la llei de Haüy, la llei de simetria.

Projecció estereogràfica dels poliedres cristal·lins

### IV. Simetria Puntual

Definició. Relacionada amb la morfologia cristal·lina però també amb el reticle. Elements i operacions de simetria.

Tipus d'operacions: rotacions, reflexions i inversions. Expressió matemàtica de les operacions de simetria més

senzilles. Rotacions possibles en el medi cristal·lí. Combinació d'operacions de simetria.

Tipus d'elements de simetria: eixos de rotació, pla de reflexió, centre de inversió i eixos de rotació-inversió. Nomenclatura, ordre (multiplicitat), símbol gràfic i projecció estereogràfica dels diferents elements de simetria puntual.

Definició de grup puntual de simetria. Projecció estereogràfica dels grups puntuals. Combinació d'elements de simetria.

Els 32 grups puntuals de simetria i la seva nomenclatura. Classificació dels grups puntuals en 7 Sistemes Cristal·lins. Relació Sistemes Cristal·lins - cel·les fonamentals.

Multiplicitat dels Grups Puntuals. Tipus de posicions: generals i especials. Formes cristal·lines. Estudi de la simetria de poliedres cristal·lins ideals.

## **V. Simetria Espacial**

Definició. Interacció translació - simetria puntual. Repetició dels elements de simetria. Nous elements de simetria: eixos helicoïdals i plans de lliscament; .

Eixos helicoïdals. Els onze tipus d'eixos helicoïdals: nomenclatura, ordre, símbol gràfic i projecció ortogonal. Exemples en estructures cristal·lines reals.

Plans de lliscament. Nomenclatura, ordre, símbol gràfic i projecció ortogonal dels principals tipus de plans de lliscament. Exemples en estructures cristal·lines reals.

La simetria espacial com a diversificació de la simetria puntual.

Els grups espacials de simetria. Obtenció dels grups espacials; exemple: grups espacials derivats del grup puntual **2**.

Nomenclatura i multiplicitat dels grups espacials: relació amb la nomenclatura i multiplicitat dels grups puntuals. Exemples.

Representació gràfica dels grups espacials. Exemple dels grups espacials derivats del grup puntual **2**. Altres exemples. Posicions generals i posicions especials. La simetria espacial a les Taules Internacionals de Cristal·lografia.

Estudi de la simetria espacial d'estructures cristal·lines reals.

## **VI. Teoria Reticular II i Difracció de Raigs X**

Nocions sobre la Xarxa Recíproca. Vectors recíprocs perpendiculars als plans reticulars (hkl). Càlcul de l'espaiat reticular.

Introducció a la Difracció dels Raigs X pels cristalls: un fenomen d'interferències constructives de gran capacitat i precisió; interacció amb els electrons dels cristalls. Obtenció dels raigs X per experiments de Cristal·lografia. La radiació K .

La difracció i l'axarxa recíproca.

La geometria de la difracció depèn del reticle: triangle de difracció, equacions de Laue, llei de Bragg, esfera d'Ewald.

La intensitat de la difracció depèn del contingut químic i la distribució dels àtoms.

Què passa quan hi ha poca cristal·linitat: temperatura, desordre, cristalls molt petits (nanomètrics).

Aparells pels experiments de difracció. La difracció de pols. L'orientació preferencial de la mostra.

La intensitat de la difracció també depèn de la simetria del sòlid cristal·lí: extincions sistemàtiques; multiplicitat

dels pics en difracció de pols. Determinació del grup espacial.

El Powder Diffraction File. Aplicacions en Geologia. Exemples.

-----  
SESSIONS DE PRÀCTIQUES (l'ordre de les pràctiques pot canviar, principalment les que es realitzen a l'aula de informàtica)

<b>Pràctica I</b>	Projecció d'estructures: rútil i altres
<b>Pràctica II</b>	Reticles: fileres i plans reticulars
<b>Pràctica III</b>	Empaquetaments compactes: hexagonal i cúbic
<b>Pràctica IV</b>	Matriu mètrica: càlcul de distàncies interatòmiques, poliedres de coordinació
<b>Pràctica V Informàtica</b>	Estructures amb CaRIne: rútil i altres
<b>Pràctica VI Informàtica</b>	Simetria Puntual: poliedres amb adobe 3D
<b>Pràctica VII</b>	Simetria Puntual: poliedres
<b>Pràctica VIII</b>	Simetria Puntual: poliedres
<b>Pràctica IX</b>	Simetria Espacial
<b>Pràctica X</b>	Simetria Espacial - Difracció de Raigs X
<b>Pràctica XI</b>	Pràctica nova o recuperació

## 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 4), 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, tant a les classes de teoria com a les sessions pràctiques; per això disposa d'apunts de classe, de material de consulta, de la bibliografia i dels exercicis/pràctiques resolts. Sense aquest treball personal no és possible accedir al coneixement de la Cristal·lografia.

## Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
<b>Tipus: Dirigides</b>			
Classes de pràctiques	28	1,12	1, 2, 3
Classes de teoria	25	1	2
<b>Tipus: Supervisades</b>			
Presentació de treballs en grup	5	0,2	1, 2, 3
<b>Tipus: Autònomes</b>			
Treball Autònom	82	3,28	1, 2, 3

## Avaluació

A mitjan semestre s'efectua una avaluació (Parcial 1) i abans de la finalització de les classes s'en efectua una altra (Parcial 2), 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 (en principi dos treballs) 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 qualificació de "no presentat", donat que la suma de les dues activitats supera el 35% de l'avaluació de l'assignatura.

Informació per a la qualificació de l'assignatura:

			pes
Avaluació global	AG		48
Parcial 1	P1		16
Parcial 2	P2		16

Treball 1	T1	10
Treball 2	T2	10
TOTAL		100

La fórmula per al càlcul de la qualificació és:

$$\text{qualificació} = (48AG+16P1+16P2+10T1+10T2) / 100$$

però amb les observacions següents:

1.- els dos parcials i els dos treballs es tenen en compte només si pugen la nota de l'avaluació global, i el pes de les que no es tenen en compte passa al de l'avaluació global.

exemple:

	pes	qualificacions	
AG	48	6,3	
P1	16	4,0	no es té en compte
P2	16	7,1	
T1	10	9,3	
T2	10	7,6	
	100		

$$\text{qualificació} = [(48+16)x6,3+16x7,1+10x9,3+10x7,6] / 100 = 6,9$$

2.- d'altra banda es requereix un promig mínim de 4 entre l'avaluació global i els dos parcials per aprovar l'assignatura:

$$(48AG+16P1+16P2) / 80 \geq 4 ; \text{ en l'exemple anterior s'obté un } 6,0$$

NO ES POSSIBLE APROVAR L'ASSIGNATURA AMB MÉS DE DUES FALTES D'ASSISTÈNCIA A PRÀCTIQUES SENSE JUSTIFICAR ADEQUADAMENT (FONAMENTALMENT PER MALALTIA O PER ALTRES PROBLEMES IMPORTANTS O GREUS A VALORAR PEL PROFESSOR)

### Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Avaluació global	48	3	0,12	1, 2, 3
Parcial 1	16	1	0,04	1, 2, 3
Parcial 2	16	1	0,04	1, 2, 3
Presentació de treballs	20	5	0,2	1, 2, 3

## 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://ruff.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)