

**Cristal·lografia Avançada i Tècniques de Difracció per a Nanomaterials****2013/2014**

Codi: 103309

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2501922 Nanociència i Nanotecnologia	OT	0	0

**Professor de contacte**

Nom: Juan Francisco Piniella Febrer

Correu electrònic: Juan.Piniella@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**

És molt recomanable que per a cursar aquesta assignatura s'hagin superat les assignatures: Laboratori de microscòpies i tècniques de caracterització de materials (2on curs), Espectroscòpia molecular (3er curs), Física i química de superfícies (3er curs) i Síntesi i estructura de materials cristal·lins i amorfs (3er curs), totes elles del grau de Nanociència i Nanotecnologia, ja que molts conceptes d'aquestes assignatures seran usats a l'assignatura Cristal·lografia avançada i tècniques de difracció per a nanomaterials.

**Objectius**

Cristal·lografia Avançada i Tècniques de Difracció per a Nanomaterials té com a objectiu el proporcionar un coneixement de les tècniques de difracció de raigs X per a ser aplicades al món dels materials i dels nanomaterials. L'aplicació d'aquestes tècniques al món de la nanociència presenta dificultats atès que el concepte de periodicitat del medi cristal·lí no es pot aplicar de la mateixa manera que en cristalls convencionals. El contingut de l'assignatura es basa en aspectes presentats anteriorment en assignatures de segon i tercer curs principalment. Dins la part de cristal·lografia avançada es parteix majorment dels coneixements impartits a l'assignatura "Síntesi i estructura de materials cristal·lins i amorfs" tot i que es fa una ampliació a fi i efecte de poder explicar, amb garanties, les tècniques de difracció que és la part que incorpora matèria nova.

**Competències**

- Nanociència i Nanotecnologia
- Adaptar-se a noves situacions.
- Aplicar els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia a la resolució de problemes de natura quantitativa o qualitativa en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se amb claredat en anglès.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar motivació per la qualitat.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la

- nanociència i la nanotecnologia.
- Desenvolupar treballs de síntesi, caracterització i estudi de les propietats dels materials en la nanoescala a partir de procediments establerts prèviament.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques, identificar-ne el significat i relacionar-les amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades.
- Liderar i coordinar grups de treball.
- Manipular els instruments i materials estàndards propis dels laboratoris d'assaigs físics, químics i biològics per a l'estudi i l'anàlisi de fenòmens en la nanoescala.
- Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
- Operar amb un cert grau d'autonomia.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer els termes relatius als àmbits de la física, la química, la biologia, la nanociència i la nanotecnologia en llengua anglesa i fer servir l'anglès de manera eficaç per escrit i oralment en l'àmbit laboral.
- Reconèixer i analitzar problemes físics, químics i biològics en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia i plantejar respostes o treballs adequats per a la seva resolució, incloent-hi en els casos necessaris l'ús de fonts bibliogràfiques.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.

## Resultats d'aprenentatge

1. Adaptar-se a noves situacions.
2. Aplicar els continguts teòrics adquirits a l'explicació de fenòmens experimentals.
3. Aplicar els resultats de les tècniques de difracció en la deducció de les característiques dels materials, en particular a allò referent a l'organització de dominis cristal·lins i al seu grau de cristal·linitat.
4. Aprendre de manera autònoma.
5. Avaluar els resultats experimentals de manera crítica i deduir-ne el significat.
6. Comprendre textos i bibliografia en anglès sobre cadascuna de les tècniques, metodologies, eines i instruments de la matèria.
7. Comunicar-se amb claredat en anglès.
8. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
9. Definir les bases de la cristal·lografia geomètrica i morfologia cristal·lina.
10. Definir les bases de les tècniques de difracció.
11. Demostrar motivació per la qualitat.
12. Descriure els fonaments de les tècniques de difracció de pols i de monocristall.
13. Descriure la teoria i fets fonamentals de la difracció de raigs X en cristalls.
14. Exposar informes breus sobre la matèria en anglès.
15. Fer cerques bibliogràfiques de documentació científica.
16. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
17. Identificar les principals variables que intervenen en els estudis de difracció i com afecten en el resultat.
18. Identificar les situacions en les quals les diferents metodologies estudiades poden ajudar a resoldre situacions problemàtiques i saber seleccionar la tècnica més òptima
19. Interpretar i racionalitzar els resultats obtinguts als estudis de difracció.
20. Liderar i coordinar grups de treball.
21. Manipular correctament els instruments i materials relacionats amb la difracció de pols i monocristall.
22. Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
23. Operar amb un cert grau d'autonomia.
24. Proposar idees i solucions creatives.
25. Raonar de forma crítica.
26. Realitzar experiments de difracció i interpretar els resultats.
27. Reconèixer els principis de la xarxa recíproca.
28. Reconèixer els termes propis de cadascun dels tòpics de la matèria Metodologies i experimentació en

nanociència i nanotecnologia.

29. Reconèixer l'ús de la radiació sincrotrònica per a estudis de caracterització de materials, nanomaterials i materials biològics.
30. Redactar informes sobre la matèria en anglès.
31. Resoldre problemes amb l'ajuda de bibliografia complementària proporcionada.
32. Resoldre problemes i prendre decisions.
33. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
34. Utilitzar a nivell d'usuari els principals programes de difracció de raigs X i les principals bases de dades.

## Continguts

Hores de docència: 34h teoria, 15 problemes, 5h pràctiques de laboratori

- 1) Complementos de simetria infinita. Les Taules internacionals de cristal·lografia: en paper i on-line.
- 2) La difracció de raigs X de monocristall. Determinació de l'estructura cristal·lina.
- 3) La difracció de raigs X de pols. Anàlisi qualitativa i anàlisi quantitativa.
- 4) El mètode de Rietveld.
- 6) Aplicacions especials: textura, stress, mida de partícula, capes primes, difusió anòmala. Experiments amb llum sincrotrònica.
- 7) Data mining: les grans bases de dades cristal·logràfiques.
- 8) Combinació amb altres mètodes de determinació estructural.

## Metodologia

Metodologia:

L'alumne realitzarà tres tipus d'activitats: dirigides, autònomes i supervisades

- 1) Activitats dirigides: L'assistència és obligada i es realitzen en presència d'un professor.

a) Classes teòriques: El professor exposa els continguts de l'assignatura i respon als possibles dubtes que tingui l'alumne.

b) Classes de problemes: Els coneixements adquirits en les classes magistrals i en les activitats autònomes de l'alumne, principalment a través de l'estudi, s'apliquen a la resolució de problemes i exercicis relatius als continguts de l'assignatura.

c) Pràctiques d'aula/Pràctiques de laboratori: Suposen la realització de treballs pràctics relatius als continguts de l'assignatura (treball amb programes per a PC i treballs de síntesi en el laboratori etc.

2) Activitats autònomes: Amb aquestes activitats l'alumne tot sol, o en grup, ha d'assolir les competències pròpies de l'assignatura. Dins aquestes activitats hi trobem l'estudi, la resolució de problemes, la redacció de treballs, la lectura de textos i la recerca de bibliografia.

3) Activitats supervisades: L'alumne pot sol·licitar al professorat de l'assignatura tutories de suport per a l'assimilació de la matèria exposada en les classes de teoria i de problemes, i per a la resolució de treballs de seguiment.

**Activitats formatives**

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de problemes	10	0,4	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 22, 23, 25, 28, 30, 31, 32, 33, 34
Classes teòriques	34,5	1,38	6, 8, 9, 10, 12, 13, 16, 27, 29
Pràctiques d'aula	8	0,32	2, 3, 5, 6, 7, 8, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 21, 22, 26, 28, 30, 31, 32, 33, 34
Tipus: Supervisades			
Tutoria	15	0,6	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34
Tipus: Autònomes			
Estudi, resolució de problemes i treball bibliogràfic	75	3	2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 22, 23, 25, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34

**Avaluació**

Avaluació de l'assignatura:

L'assignatura serà avaluada de forma continuada i constarà de les activitats d'avaluació següents:

Avaluació de la part teòrica

Representa el 60% de la nota final. L'alumne pot optar per dos vies d'avaluació d'aquesta part:

- 1) L'avaluació continuada en la que es realitzaran 2 proves parcials
- 2) L'avaluació final on es realitzarà una única prova final.

Avaluació continuada

primer parcial: s'avaluaran els continguts dels temes 1 al 3 (30% de la nota final).

segon parcial: s'avaluaran els continguts dels temes 4 al 8 (30% de la nota final).

Si se superen aquestes proves amb una nota mitjana superior a 5 (sempre que la nota d'una part no sigui inferior a 3), l'alumne pot aprovar per curs.

Avaluació final

Els alumnes realitzaran una única prova final que inclourà tota la teoria.

Els alumnes que hagin fet l'avaluació continuada poden aquesta avaluació final per a millorar la nota de teoria.

Avaluació de la part de problemes (20%).

Correspon a la resolució de problemes que s'hauran lliurat a l'aula i que l'estudiant ha de respondre en un temps determinat.

Avaluació de treballs(20%)

Correspon a l'elaboració de treballs (traduccions, recerques biogràfiques...) que es plantejaran als alumnes.

**Activitats d'avaluació**

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Exàmens escrits	60%	6,25	0,25	1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 15, 16, 17, 18, 19, 23, 24, 25, 27, 28, 29, 31, 32, 34

Resolució de problemes	20%	0,25	0,01	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34
Treball sobre un text científic	20%	1	0,04	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34

## Bibliografia

1) C. Giacovazzo, H. L. Monaco, G. Artioli, D. Viterbo, M. Milanese, G. Ferraris, G. Gilli, P. Gilli, G. Zanotti . "Fundamentals of Crystallography" Edited by C. Giacovazzo. 3rd edition, IUCr Texts on and M. Catti

Crystallography No. 15, IUCr/Oxford University Press, 2011. ISBN 978-0-19-957365-3.

2) M. Birkholz "Thin Film Analysis by X-Ray Scattering".

Copyright © 2006 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

ISBN:3-527-31052-5

3)Unió Internacional de Cristal·lografia

<http://www.iucr.org/>

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

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