

## Cristal·lografia

2014/2015

Codi: 101059

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2500254 Geologia	OB	1	2

### Professor de contacte

Nom: Eugenia Estop Graells

Correu electrònic: Eugenia.Estop@uab.cat

### Utilització de llengües

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Grup íntegre en anglès: No

Grup íntegre en català: Sí

Grup íntegre en espanyol: No

### Equip docent

Juan Francisco Piniella Febrer

Lluís Casas Duocastella

### Prerequisits

Aquesta assignatura no té prerequisits oficials 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

Sense un nivell bàsic d'aquests temes no és possible saber cristal·lografia i superar l'assignatura i per això es recomana especialment recuperar, també del batxillerat, el material, exercicis i textos treballats.

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

Classes de Teoria

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. Coordenades atòmiques. 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.

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 de simetria. Simetria Puntual i Simetria Espacial. Elements i operacions de simetria.

Tipus d'operacions: rotacions, reflexions i inversions. Rotacions possibles en el medi cristal·lí.

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. Els 32 grups puntuals de simetria, la seva projecció estereogràfica i la seva classificació 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.

Expressió matemàtica de les operacions de simetria més senzilles. Combinació d'operacions de simetria i combinació d'elements de simetria.

#### 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.

Canvis de coordenades en simetria espacial.

Notació i multiplicitat dels grups espacials.

Posicions generals i posicions especials (posicions de Wyckoff ).

Exemples d'obtenció del grup espacial a partir de les coordenades atòmiques d'estructures reals.

La simetria espacial a les Taules Internacionals de Cristal·lografia.

#### VI. Difracció de Raigs X pels cristalls

Introducció. Les ones electromagnètiques i els raigs X.

La llei de Bragg.

El difractòmetre i el diagrama de difracció de pols cristal·lina. Exemples.

#### Classes de Pràctiques

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

Pràctica II

Fileres i plans reticu

Pràctica III

Apilaments compac

## Metodologia

Pràctica IV

Matriu mètrica i apli

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.

Pràctica V

Simetria Puntual

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 utilitzant software cristal·logràfic. Els estudiants disposen d'un guió del treball que han de desenvolupar. 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.

Pràctica VI Informàtica

Simetria Puntual: pc

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, dels exercicis/pràctiques i del software cristal·logràfic (aquest darrer, ja sigui a l'abast a les aules del servei d'informàtica, ja sigui programari lliure disponible a <http://departaments.uab.cat/geologia/PSG>). Sense aquest treball personal no és possible accedir al coneixement de la Cristal·lografia i superar l'assignatura. També s'insisteix en la conveniència d'assistir a totes les classes (teoria i pràctiques), ja que no és fàcil iniciar-se en la matèria sense l'orientació i la pauta que el professor dóna a classe.

Pràctica VIII Informàtica

Estructures amb el (

Es realitzarà un concurs entre els estudiants, de l'ús de l'app per a dispositius mòbils "Quiztallography" desenvolupada per professorat del Departament de Geologia

Pràctica X

Simetria Espacial

Es realitzaran controls d'assistència a classe: a teoria seran controls aleatoris i a pràctiques es faran controls sistemàtics. L'assistència a pràctiques és obligatòria.

Pràctica XI

Difracció de Raigs &gt;

El Campus Virtual s'utilitza com a medi de comunicació amb l'alumne, PERO EN CAP CAS SUBSTITUEIX LA PRESENCIA A CLASSE

## Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de pràctiques	25	1	1, 2, 3
Classes de teoria	26	1,04	2
Tipus: Autònomes			
Treball Autònom	91,5	3,66	1, 2, 3

## Avaluació

L'avaluació de l'assignatura es realitzarà a partir de dos exàmens parcials. Els dos parcials es faran durant el curs.

A l'exàmen final es podran recuperar els dos parcials suspesos (nota inferior a 5).

Per aprovar l'assignatura caldrà una nota mínima de 3,5 en cada parcial. L'obtenció d'una qualificació inferior a 3,5 en un dels dos parcials encara que el promig sigui de 5 o superior implicarà un suspens.

El pes de cada parcial pot oscil·lar entre el 40% i el 60%. El pes final de cada parcial dins d'aquest interval es decidirà en funció del desenvolupament del curs.

En l'avaluació es tindrà en compte l'assistència a classe. A més, l'absència a més de dues sessions de pràctiques implicarà la impossibilitat d'aprovar l'assignatura. En el cas dels alumnes que repeteixen l'assignatura es valorarà quines són les pràctiques que obligatòriament hauran de fer.

## Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Examen final: recuperació Parcial 1 i recuperació Parcial 2	El pes de cada parcial pot variar entre un 40% i un 60%	3,5	0,14	1, 2, 3
Parcial 1	mínim 40%, màxim 60%	2	0,08	1, 2, 3
Parcial 2	mínim 40%, màxim 60%	2	0,08	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

Cristal·lografia 2014 - 2015

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://departaments.uab.cat/geologia/PSG> Accés a programari desenvolupat pel professorat de l'assignatura

<https://play.google.com/store/apps/details?id=aax.uab.quiztallography&hl=ca> App per a mòbils:  
Quiztallography

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

<http://www.iycr2014.org/learn>

<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)