

Cristal·lografia

Codi: 101059
Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2500254 Geologia	OB	1	2

Professor/a de contacte

Nom: Ignacio Ramón Mata Martínez
Correu electrònic: Ignasi.Mata@uab.cat

Utilització d'idiomes a l'assignatura

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 anteriorment en Matemàtiques, Física i Química.

Més en particular, cal tenir uns coneixements bàsics en:

- 1- Formulació Química
- 2- València i tipus d'enllaç entre àtoms
- 3- Càlcul matricial
- 4- Càlcul vectorial

Sense un nivell bàsic d'aquests temes no es pot accedir a l'estudi de la cristal·lografia i per això es recomana recuperar els coneixements adquirits al batxillerat i al primer semestre de Geologia. En cas que no s'haguéssin cursat els punts 1 a 4 indicats anteriorment s'aconsella seguir algun curs durant l'estiu, o bé abordar l'estudi d'aquests punts de manera autodidacte.

D'altra banda convé destacar que l'aprenentatge i l'aplicació de la Cristal·lografia en l'estudi dels minerals, 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 (àtoms) 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 helicoidals i plans de lliscament; .

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

Plans de lliscament. Notació, 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.

El Powder Diffraction File.

Classes de Pràctiques

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

Pràctica I: Projecció d'estructures cristal·lines

Pràctica II: Fileres i plans reticulars

Pràctica III: Apilaments compactes

Pràctica IV: Matriu mètrica i aplicacions

Pràctica V - Informàtica: Representació en 3D de diverses estructures cristal·lines amb programes cristal·logràfics

Pràctica VI: Simetria puntual: treball amb modes cristal·logràfics

Pràctica VII - Informàtica: Simetria puntual: treball amb fitxes 3D interactives en format adobe

Pràctica VIII: Simetria puntual: treball amb models cristal·logràfics i amb les fitxes interactives

Pràctica IX: Simetria espacial: funcionament de diversos elements de simetria espacial

Pràctica X: Simetria espacial: anàlisi de la simetria espacial de diverses estructures cristal·lines

Pràctica XI: Difracció de raigs X: anàlisi de diferents aspectes de la difracció de raigs X a través d'exemples.

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 grup; 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 dur a terme. 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, 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.

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**, excepte pels estudiants repetidors en funció de les pràctiques realitzades el curs o cursos anteriors.

El Campus Virtual s'utilitza com a medi de comunicació amb l'alumne i és el lloc on s'hi dipositen els guions de les pràctiques, material específic de consulta, guions de les classes de teoria, qualificacions, etc. Els **guions de les classes** de teoria constitueixen una base per a les classes, però **en cap cas substitueixen l'assistència 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	1, 2
Tipus: Autònomes			
Treball Autònom	88	3,52	1, 2, 3

Avaluació

L'avaluació de l'assignatura comprèn l'avaluació continuada i l'examen final o de recuperació.

L'avaluació continuada comprèn dos exàmens parcials, el primer dels quals es preveu per a principis d'abril i el segon cap a finals de maig. El pes relatiu de cadascun d'aquests parcials en la nota global serà el 40% de la qualificació global. L'avaluació continuada també pot incloure l'avaluació d'entregues, ja sigui alguna pràctica, exercici, treball o qüestionari plantejat a classe. Aquestes entregues representaran un 20% de la qualificació global.

Es pot **aprovar l'assignatura per avaluació continuada** sense necessitat de presentar-se a l'examen final. En aquest cas cal que es compleixin les tres condicions següents:

- 1) haver obtingut una **qualificació global no inferior a 5 punts**
- 2) haver obtingut un **mínim de 3,5 punts en cadascun dels dos parcials**
- 3) no haver faltat a pràctiques **més d'una vegada** (s'entén sense una causa de força major que avaluarà el professor donat el cas, i amb la documentació que es pogués requerir). Aquest requisit s'aplicarà de manera diferent als estudiants repetidors, en funció de les pràctiques realitzades el curs o cursos anteriors.

L'examen final o de recuperació del mes de juny constitueix la oportunitat de recuperar un dels parcials o tots dos, en cas de tenir una qualificació inferior a 3,5 punts o no arribar al 5 de nota global. De tota manera també és pot recuperar algun dels parcials o tots dos amb la intenció de millorar-la nota.

En cas de recuperació, la qualificació final de cadascun dels parcials s'obtindrà fent la mitjana de la nota obtinguda durant el curs i de la nota de recuperació.

L'anterior punt 3) referent a l'assistència a pràctiques és d'aplicació a tots els estudiants, amb independència d'haver-se presentat o no a recuperació.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Examen final: recuperació Parcial 1 i recuperació Parcial 2	40% per cada parcial	3	0,12	1, 2, 3
Lliurament de treballs	20%	4	0,16	1, 2, 3
Parcial 1	40%	2	0,08	1, 2, 3
Parcial 2	40%	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**

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.iucr.org/education/pamphlets> Teaching pamphlets

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://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/xray-diffraction/index.php>

http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/crystallographic_texture/texture_measurement.php