

Cristal·lografia

Codi: 101059
Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2500254 Geologia	OB	1	2

La metodologia docent i l'avaluació proposades a la guia poden experimentar alguna modificació en funció de les restriccions a la presencialitat que imposin les autoritats sanitàries.

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

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

(l'ordre dels temes de teoria pot canviar)

I. Introducció

II. Teoria Reticular

III. Morfologia Cristal·lina

IV. Simetria Puntual

V. Simetria Espacial

VI. Difracció de Raigs X pels cristalls

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).

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.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

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. L'avaluació continuada també inclourà l'avaluació d'entregues, ja sigui alguna pràctica, exercici, treball o qüestionari plantejat a classe. Aquestes entregues representaran un 20 - 30% de la qualificació global.

Es pot aprovar l'assignatura per avaluació continuada sense necessitat de presentar-se a l'examen final si s'arriba a una nota global de 5.

L'examen de recuperació del mes de juny constitueix l'oportunitat de recuperar un o dos dels parcials. En aquest cas, la qualificació obtinguda a l'examen de recuperació substituirà a l'examen parcial corresponent. Les entregues avaluable no són recuperables.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Examen de recuperació: recuperació d'un o dos exàmens parcials	35 - 40% per cada examen parcial	3	0,12	1, 2, 3
Examen parcial 1	35 - 40%	2	0,08	1, 2, 3
Examen parcial 2	35 - 40%	2	0,08	1, 2, 3
Lliurament de treballs	20 - 30%	4	0,16	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

Programari

VESTA: <https://jp-minerals.org/vesta/en/>