Universitat Autònoma de Barcelona

2023/2024

Cristalografía

Código: 101059
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2500254 Geología	OB	1	2

Contacto

Nombre: Ignacio Ramon Mata Martínez

Correo electrónico: ignasi.mata@uab.cat

Idiomas de los grupos

Puede consutarlo a través de este enlace. Para consultar el idioma necesitará introducir el CÓDIGO de la asignatura. Tenga en cuenta que la información es provisional hasta el 30 de noviembre del 2023.

Equipo docente

Lluis Casas Duocastella

Prerrequisitos

Esta asignatura no tiene prerequisitos formales establecidos para ser cursada.

Es conveniente recordar y repasar los conocimientos adquiridos anteriormente en Matemáticas, Física y Química.

En particular, es necesario tener unos conocimientos básicos en:

1.- Formulación química

2.- Valencia y tipos de enlace entre átomos

3.- Cálculo matricial

4.- Cálculo vectorial

Objetivos y contextualización

Se trata de una asignatura básica del primer curso, con aplicaciones directas en Mineralogía de segundo curso y posteriormente, en Petrología y otras materials.

En consecuencia, los objetivos son:

I. Adquirir conocimientos básicos sobre:

1- El retículo cristalino y su descripción matemática, como base para la descripción de las estructuras cristalinas de los minerales.

2.- La simetría cristalina y su descripción matemática, como base para la descripción de las estructuras cristalinas de los minerales.

II. Conocer las bases necesarias de la difracción de rayos X en cristales para poder aplicar esta técnica en la asignatura de Mineralogía de segundo curso.

III. Adquirir visión espacial de las estructuras cristalinas y su simetría.

IV. Saber efectura tareas sencillas con software propio de la cristalografía.

V. Tener las bases para poder relacionar las propiedades físicas de la materia con su estructura.

Competencias

- Aprender y aplicar a la práctica los conocimientos adquiridos, y para resolver problemas.
- Relacionar las propiedades físicas de la materia con su estructura.
- Trabajar con autonomía.

Resultados de aprendizaje

1. Aprender y aplicar a la práctica los conocimientos adquiridos, y para resolver problemas.
2. Relacionar las propiedades físicas de la materia con su estructura.
3. Trabajar con autonomía.

Contenido

Clases de teoría

(el orden de los temas puede cambiar)

I. Introducción

II. Morfología cristalina

III. Simetría puntual

IV. Teoría reticular

V. Simetría espacial

VI. Difracción de rayos X por los cristales

Clases de prácticas
(el orden de las prácticas puede cambiar, principalmente en las que se realizan en aula de informática)

Práctica I: Proyección de estructuras cristalinas.

Práctica II: Filas y planos reticulares

Práctica III: Apilamientos compactos

Práctica IV: Matriz métrica y aplicaciones

Práctica V: Representación en 3D de diversas estructruras cristalinas con programas cristalográficos

Práctica VI: Simetría puntual. Trabajo con modelos cristalográficos

Práctica VII: Simetría puntual. Trabajo con fichas 3D interactivas en formato PDF.

Práctica VIII: Simetría puntual. Trabajo con modelos cristalográficos y fichas interactivas

Práctica IX: Simetría espacial. Funcionamiento de diversos elementos de simetría espacial.

Práctica X: Simetría espacial. Análisis de la simetría espacial de diversas estructuras cristalinas.

Práctica XI: Difracción de rayos X. Análisis de diferentes aspectos de la difracción de rayos X a través de ejemplos.

Metodología

Las clases de teoría se desarrollan como sesiones clásicas con explicaciones del profesor, preguntas y discusiones con los estudiantes y resolución de ejercicios y problemas.

Las sesiones de prácticas se desarrollan en grups, en un espacio de mesas amplias donde los estudiantes pueden trabajar fácilmente en grupo. Algunas de las sesiones prácticas se realiza en aula de informática utilizando software cristalográfico. Los estudiantes disponen de un guión del trabajo que tienen que llevar a término. El profesor ayuda, resuelve dudas en grupo o en persona, y da el resultado correcto de la práctica, ya sea en la misma aula o en el campus virtual de la asignatura.

El trabajo autónomo del estudiante consiste en que él trabaje personalmente todos los aspectos planteados al aula, tanto en las clases de teoría como en las sesiones prácticas. Para ello dispon de los apuntes de clase, del material de consulta, de la bibliografía, de los ejercicios/prácticas y del software cristalográfico, este último, ya sea disponible en las aulas de informática o como programario libre.

El Campus Virtual será utilizado como medio de comunicación con el alumno y es el lugar donde se depositan los guiones de las prácticas, material específico de consulta, guiones de las clases de teoría, calificaciones, etc. Los guiones de las clases de teoría constituyen una base para las clases, pero en ningún caso sustituyen la asistencia a clase.

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases de prácticas	25	1	1, 2, 3
Clases de teoría	26	1,04	1, 2
Tipo: Autónomas			

Trabajo autónomo	88	3,52	1, 2, 3

Evaluación

La evaluación de la asignatura comprende la evaluación continua y el examen final o de recuperación.

La evaluación continua comprende dos exámenes parciales, el primero de los cuales se prevé para principios d

La evaluación continua también incluirá la evaluación de entregas, ya sea alguna práctica, ejercicio, trabajo o cu
Se puede aprobar la asignatura por evaluación continua sin necesidad d
El examen de recuperación de junio constituye la oportunidad de recupe

En este caso, la calificación obtenida en el examen de recuperación sustituirá al examen parcial correspondient
En caso de que el estudiante solicite evaluación única (en la forma y fec

se realizará una evaluación preferentemente coincidente con la fecha de la evaluación de la segunda parte de la
1-Superación de un examen de toda la asignatura (70% de la nota globa
2-La entrega de un trabajo a realizar con software cristalográfico (10% d
3-Una prueba oral donde se presentarán modelos de cristales y se harán

En caso de no superar la evaluación única, se tendrá derecho a un segundo examen donde la nota sustituirá a l

Este segundo examen se realizará preferentemente el mismo día del examen de recuperación. Tanto el trabajo

Actividades de evaluación continuada

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Entrega de trabajos	20 - 30%	4	0,16	1, 2, 3
Examen de recuperación: recuperación de uno o dos exámenes parciales	35 - 40% por 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

Bibliografía

• Cristal·lografia. Teoria Reticular, Grups Puntuals i Grups Espacials

SALVADOR GALÍ MEDINA, Edicions de la Universitat de Barcelona

Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

• 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

• Introduction à la Cristallographie et à la Chimie Structurale

M. VAN MEERSSCHE et J. FENEAU-DUPONT, Oyez

Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

• An Introduction to Crystal Chemistry

R.C. EVANS, Cambridge University Press

Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

· Estructura atómica y enlace químico

JAUME CASABÓ I GISPERT, Editorial Reverté

Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

· Introduction to Mineral Science

A. PUTNIS, Cambridge University Press

Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

· Crystallography

WALTER BORCHARDT-OTT, Springer Verlag

Biblioteca Facultat de Ciències i ETSE

Páginas web

http://departaments.uab.cat/geologia/PSG

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

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

http://www.iucr.org/education/pamphlets Teaching pamphlets

http://reference.iucr.org/dictionary/Main_Page

http://it.iucr.org/ International Tables for Crystallography

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

Software

Ficheros PDF interactivos:
https://www.uab.cat/web/la-divulgacio/grups-puntuals-de-simetria-1345664584325.html

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

Quiztallography (Android) https://play.google.com/store/apps/details?id=aax.uab.quiztallography&pli=1