

Cristal·lografia

Codi: 106812
Crèdits: 6

2024/2025

Titulació	Tipus	Curs
2504602 Nanociència i Nanotecnologia	OB	1

Professor/a de contacte

Nom: Ignacio Ramon Mata Martínez

Correu electrònic: ignasi.mata@uab.cat

Equip docent

Anna Crespi Revuelta

Lluís Casas Duocastella

Idiomes dels grups

Podeu consultar aquesta informació al [final](#) del document.

Prerequisits

L'assignatura no té prerequisits establerts per ser cursada. Son necessaris coneixements bàsics de matemàtiques, física i química. En particular, es requereixen coneixements bàsics en:

- Formulació química
- València i tipus d'enllaç
- Càlcul matricial
- Càlcul vectorial
- Física d'ones

Objectius

Aquesta assignatura proporciona coneixements bàsics sobre com s'organitzen els àtoms en estat sòlid.

Els objectius són:

I. Adquirir un coneixement bàsic per a la descripció de l'estructura cristal·lina dels sòlids. Els aspectes a considerar són:

1- La xarxa cristal·lina i la seva descripció matemàtica.

2- La simetria cristal·lina i la seva descripció matemàtica.

II. Conèixer les bases de la difracció dels raigs X dels cristalls com a tècnica experimental que permeteix accedir a l'estructura cristal·lina dels sòlids.

III. Adquirir visió espacial de les estructures cristal·lines i la seva simetria.

IV. Saber realitzar tasques senzilles amb software propi de cristal·lografia.

V. Saber com el tipus d'enllaç es relaciona amb l'estructura cristal·lina i conèixer els tipus estructurals més importants.

VI. Tenir les bases per a poder relacionar les propietats físiques de la matèria amb la seva estructura cristal·lina inclosos els efectes deguts a tenir mides de cristall d'escala nano.

Resultats d'aprenentatge

1. CM13 (Competència) Aplicar els coneixements químics a la resolució de problemes de naturalesa quantitativa i qualitativa, incloent-hi, en casos necessaris, l'ús de fonts bibliogràfiques.
2. CM14 (Competència) Treballar de forma col·laborativa plantejant i organitzant les tasques bàsiques d'un laboratori d'anàlisi fisicoquímica.
3. KM25 (Coneixement) Reconèixer i descriure els models geomètrics i la simetria que caracteritza el medi cristal·lí.
4. SM22 (Habilitat) Justificar la variació de les propietats dels elements químics i els seus compostos, a partir dels grups de la taula periòdica i l'estructura cristal·lina.

Continguts

Temari

(l'ordre dels temes pot canviar)

1. Teoria reticular
2. Simetria puntual
3. Simetria espacial
4. Estructures cristal·lines
5. Morfologia cristal·lina
6. Difracció de raigs X
7. Cristall real i efectes de la mida de cristall

Pràctiques

(l'ordre i el contingut de les pràctiques pot variar)

Pràctica 1: Simetria puntual amb models cristal·logràfics

Pràctica 2: Simetria puntual amb PDF interactius

Pràctica 3: Grups de simetria plana

Pràctica 4: Visualització d'estructures cristal·lines amb VESTA

Pràctica 5: Difracció de pols

Pràctica 6: Bases de dades de cristal·lografia

Activitats formatives i Metodologia

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes de problemes	5	0,2	
Classes de teoria	35	1,4	
Pràctiques de laboratory	12	0,48	
Tipus: Autònomes			
Treball autònom	87	3,48	

Les classes de teoria es desenvolupen com a sessions clàssiques amb explicacions del professorat, preguntes i discussions amb l'alumnat.

Les classes de problemes es desenvolupen en dos grups i consistiran en la resolució d'exercicis i problemes prèviament subministrat a l'alumnat. Un cop realitzats els exercicis a classe, les solucions estaran disponibles al campus virtual.

Les sessions de pràctiques es desenvolupen en tres grups, si es possible en espais que facilitin el treball en grup o en aules que permetin l'us d'ordinadors (aules electrificades o aules PC). L'alumnat disposa d'un guió de treball que ha de dur a terme amb el suport del professorat. Es proporcionarà el resultat correcte de la pràctica ja sigui a la mateixa aula o al campus virtual de l'assignatura.

El treball autònom de l'alumnat consisteix en treballar personalment tots els aspectes plantejats a l'aula, tant a les classes de teoria com a les de problemes i 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'alumnat 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.

Avaluació

Activitats d'avaluació continuada

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Entregues	20 - 30 %	4	0,16	CM13, CM14, KM25, SM22
Examen de recuperació	35 - 40 % cada part	3	0,12	CM13, KM25, SM22
Examen parcial 1	35 - 40 %	2	0,08	CM13, KM25, SM22
Examen parcial 2	35 - 40 %	2	0,08	CM13, KM25, SM22

L'avaluació de l'assignatura inclou tant una avaluació contínua com un examen final o de recuperació.

L'avaluació continuada consta de dos exàmens parcials. El primer està previst per a la primera quinzena d'abril i el segon per al juny. Cada examen representa el 40% de la qualificació global. L'avaluació contínua també inclou l'avaluació dels treballs, l'assistència a classe, els exercicis, els treballs o les proves realitzades a classe. Aquests treballs representen entre el 20 de la nota global.

L'assignatura es pot aprovar per avaluació continuada sense necessitat de presentar-se a l'examen final si s'assoleix una nota global de 5. L'examen de recuperació del juny és una oportunitat per recuperar un o dos parcials. En aquest cas, la nota obtinguda en l'examen de recuperació substituirà l'examen parcial corresponent. Els lliuraments avaluable no són recuperables.

Es considerarà no avaluable l'alumnat que no s'hagi presentat a cap dels exàmens.

Avaluació única

L'avaluació única dels alumnes que la sol·licitin es farà el dia de la segona part de l'assignatura. Aquesta avaluació consistirà en:

1-Superació d'un examen de tota l'assignatura (70% de la nota global).

2-El lliurament d'un treball a realitzar amb programari cristal·logràfic (10% de la nota global).

3-Una prova oral on es presentaran models de cristalls i es faran preguntes sobre la seva simetria (20% de la nota global).

En cas de no superar l'avaluació única, es tindrà dret a un segon examen on la nota substituirà la nota del primer examen. Aquest segon examen es farà preferentment el mateix dia de l'examen de recuperació. Tant el treball com la prova oral no es poden recuperar.

Bibliografia

Llibres

· An introduction to Mineral Science

A. PUTNIS, Cambridge University Press

· Fundamentals of Crystallography

C. GIACOVAZZO, Oxford University Press

· Space groups for solid state scientists

G. BURNS, A. M. GLAZER, Elsevier

· The Basics of Crystallography and Diffraction

C. HAMMOND, Oxford University Press

· Crystallography

WALTER BORCHARDT-OTT, Springer Verlag

· Estructura atómica y enlace químico

JAUME CASABÓ I GISPERT, Editorial Reverté

• An Introduction to Crystal Chemistry

R.C. EVANS, Cambridge University Press

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

SALVADOR GALÍ MEDINA, Edicions de la Universitat de Barcelona

• International Tables for Crystallography. Volume A: Space-Group Symmetry (teaching edition)

T. HAHN, editor, The International Union of Crystallography, D. Reidel Publishing Company

Pàgines web

<https://www.uab.cat/web/la-divulgacio/grups-puntuals-de-simetria-1345664584325.html>

<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://www.crystallography.net/cod/> Crystallography Open Database

<http://ruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php> American Mineralogist Crystal Structure Database

Programari

PDF interactius: <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>

Llista d'idiomes

Nom	Grup	Idioma	Semestre	Torn
-----	------	--------	----------	------

(PAUL) Pràctiques d'aula	1	Català	segon quadrimestre	tarda
(PAUL) Pràctiques d'aula	2	Català	segon quadrimestre	tarda
(PLAB) Pràctiques de laboratori	1	Català	segon quadrimestre	matí-mixt
(PLAB) Pràctiques de laboratori	2	Català	segon quadrimestre	matí-mixt
(PLAB) Pràctiques de laboratori	3	Català	segon quadrimestre	matí-mixt
(TE) Teoria	1	Català	segon quadrimestre	tarda