

Cristalografía

Código: 106812
Créditos ECTS: 6

2024/2025

| Titulación | Tipo | Curso |
|--------------------------------------|------|-------|
| 2504602 Nanociencia y Nanotecnología | OB | 1 |

Contacto

Nombre: Ignacio Ramon Mata Martínez

Correo electrónico: ignasi.mata@uab.cat

Equipo docente

Anna Crespi Revuelta

Lluis Casas Duocastella

Idiomas de los grupos

Puede consultar esta información al [final](#) del documento.

Prerrequisitos

La asignatura no tiene requisitos previos para ser cursada. Son necesarios conocimientos básicos de matemáticas, física y química. En particular, se requieren conocimientos básicos en:

- Formulación química
- Valencia y tipo de enlace
- Cálculo matricial
- Cálculo vectorial
- Física de ondas

Objetivos y contextualización

Esta asignatura proporciona conocimientos básicos sobre cómo se organizan los átomos en el estado sólido. Los objetivos son:

I. Adquirir un conocimiento básico para la descripción de la estructura cristalina de los sólidos. Los aspectos a considerar son:

- 1- La red cristalina y su descripción matemática

2- La simetría cristalina y su descripción matemática

II. Conocer las bases de la difracción de rayos X en cristales como técnica experimental que permita acceder a la estructura cristalina de los sólidos.

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

IV. Saber realizar tareas sencillas con software propio de la cristalográfia

V. Saber cómo el tipo de enlace se relaciona com la estructura cristalina y conocer los tipos estructurales más importantes.

VI. Tener las bases para poder relacionar las propiedades físicas de la materia con su estructura cristalina, incluidos los efectos debidos a tener tamaño de cristal de escala nanométrica.

Resultados de aprendizaje

1. CM13 (Competencia) Aplicar los conocimientos químicos a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa y cualitativa, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas.
2. CM14 (Competencia) Trabajar de forma colaborativa planteando y organizando las tareas básicas de un laboratorio de análisis físico-químico.
3. KM25 (Conocimiento) Reconocer y describir los modelos geométricos y la simetría que caracteriza el medio cristalino.
4. SM22 (Habilidad) Justificar la variación de las propiedades de los elementos químicos y sus compuestos, en base a los grupos de la tabla periódica y la estructura cristalina.

Contenido

Temario

(el orden de los temas puede cambiar)

1. Teoría reticular
2. Simetría puntual
3. Simetría espacial
4. Estructuras cristalinas
5. Morfología cristalina
6. Difracción de los rayos X
7. Cristal real y efectos del tamaño de cristal

Prácticas

(el orden y el contenido de las prácticas puede variar)

Práctica 1: Simetría puntual con modelos cristalográficos

Práctica 2: Simetría puntual con PDF interactivos

Práctica 3: Grupos de simetría plana

Práctica 4: Visualización de estructuras cristalinas con VESTA

Práctica 5: Difracción de polvo

Práctica 6: Bases de datos en cristalográfica

Actividades formativas y Metodología

| Título | Horas | ECTS | Resultados de aprendizaje |
|--------------------------|-------|------|---------------------------|
| Tipo: Dirigidas | | | |
| Clases de problemas | 5 | 0,2 | |
| Clases de teoría | 35 | 1,4 | |
| Prácticas de laboratorio | 12 | 0,48 | |
| Tipo: Autónomas | | | |
| Trabajo autónomo | 87 | 3,48 | |

Las clases de teoría se desarrollan como sesiones clásicas con explicaciones del profesorado, preguntas y discusiones con el alumnado.

Las clases de problemas se desarrollan en dos grupos y consisten en la resolución de ejercicios y problemas previamente suministrados al alumnado. Una vez realizados los ejercicios en clase, las soluciones estarán disponibles en el campus virtual.

Las sesiones de prácticas se desarrollan en tres grupos, si es posible en espacios que faciliten el trabajo en grupo y en aulas que permitan el uso de ordenadores (aulas electrificadas o aulas PC). El alumnado dispone de un guion de trabajo que de llevar a término con el soporte del profesorado. Se proporcionará el resultado correcto de la práctica ya sea en la misma aula o el campus virtual de la asignatura.

El trabajo autónomo del alumnado consiste en trabajar personalmente todos los aspectos planteados en el aula, tanto en las clases de teoría como en las de problemas y las sesiones prácticas; para ello dispone de apuntes de clase, material de consulta, bibliografía, ejercicios/prácticas y software cristalográfico (este último, ya sea disponible en las aulas del servicio de informática, ya sea como programario libre).

El campus virtual es utilizado como medio de comunicación con el alumnado 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.

Evaluación

Actividades de evaluación continuada

| Título | Peso | Horas | ECTS | Resultados de aprendizaje |
|------------------------|----------------------|-------|------|---------------------------|
| Entregas | 20 - 30 % | 4 | 0,16 | CM13, CM14, KM25, SM22 |
| Examen de recuperación | 35 - 40 % cada parte | 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 |

La evaluación de la asignatura incluye tanto una evaluación continua como un examen final o de recuperación.

La evaluación continua consta de dos exámenes parciales. El primero está previsto para la primera quincena de abril y el segundo para junio. Cada examen representa el 40% de la calificación global. La evaluación continua también incluye la evaluación de los trabajos, la asistencia a clase, los ejercicios, los trabajos o las pruebas realizadas en clase. Estos trabajos representan 20% de la nota global.

Se puede aprobar la asignatura por evaluación continua sin necesidad de presentarse al examen final si se consigue una nota global de 5.

El examen de recuperación de junio es una oportunidad para recuperar uno o dos parciales. En este caso, la nota obtenida en el examen de recuperación sustituirá el examen parcial correspondiente. Las entregas evaluables no son recuperables.

Se considerará no evaluable el alumnado que no se haya presentado a ningún examen.

Evaluación única

La evaluación única de los alumnos que lo soliciten se realizará el día del segundo parcial de la asignatura. Esta evaluación consistirá en:

- 1- Superación de un examen de toda la asignatura (70% de la nota global).
- 2- Entrega de un trabajo a realizar con programario cristalográfico (10% de la nota global).
- 3- Una prueba oral donde se representan modelos de cristales y se hacen preguntas sobre su simetría (20% de la nota global).

En caso de no superar la evaluación única, se tendrá derecho a un segundo examen donde la nota sustituirá la nota del primer examen. Este segundo examen se realizará preferentemente el mismo día del examen de recuperación. Tanto el trabajo a entregar como la prueba oral no se pueden recuperar.

Bibliografía

Libros

- 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

Pàginas 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://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php> American Mineralogist Crystal Structure Database

Software

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

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

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

Lista de idiomas

| Nombre | Grupo | Idioma | Semestre | Turno |
|--------|-------|--------|----------|-------|
|--------|-------|--------|----------|-------|

| | | | | |
|---------------------------------|---|---------|----------------------|--------------|
| (PAUL) Prácticas de aula | 1 | Catalán | segundo cuatrimestre | tarde |
| (PAUL) Prácticas de aula | 2 | Catalán | segundo cuatrimestre | tarde |
| (PLAB) Prácticas de laboratorio | 1 | Catalán | segundo cuatrimestre | mañana-mixto |
| (PLAB) Prácticas de laboratorio | 2 | Catalán | segundo cuatrimestre | mañana-mixto |
| (PLAB) Prácticas de laboratorio | 3 | Catalán | segundo cuatrimestre | mañana-mixto |
| (TE) Teoría | 1 | Catalán | segundo cuatrimestre | tarde |