

DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA

Titulación: Licenciatura en Química	Plan: 2004
Asignatura: Cristalografía	Código: 8005
Tipo: Obligatoria	Cuatrimestre: 1º
Créditos Totales LRU: 6	Teóricos: 4,5
Créditos ECTS: 5,5	Prácticos: 1,5
	Teóricos: 4,1
	Prácticos: 1,4

DATOS BÁSICOS DE LOS PROFESORES

Profesor responsable: Juan Carlos Fernández Caliani

Otros profesores:

Departamento: Geología

Área de Conocimiento: Cristalografía y Mineralogía

Despacho: Facultad de Ciencias Experimentales
Planta 3ª, Núcleo 2º, Núm. 15

Teléfono: 959 21 98 20 **E-mail:** caliani@uhu.es

Dirección página web:

www.uhu.es/jc.caliani

DATOS ESPECÍFICOS DE LA ASIGNATURA

Descriptor (BOE): Simetría Cristalina. Cristalografía Estructural: red cristalina y red recíproca, motivos de repetición y grupos espaciales

Contexto de la asignatura:

La Cristalografía es una ciencia básica e interdisciplinar, cuyas bases conceptuales y aplicaciones son cada vez más importantes para la Química. Por esta razón, se trata de una asignatura obligatoria de primer curso de la Licenciatura, que introduce al estudiante en el conocimiento de la materia condensada, a nivel atómico, lo cual facilita la comprensión y seguimiento de las asignaturas de cursos más avanzados, y ofrece mayor solidez en la formación básica de la profesión.

Recomendaciones:

Para cursar esta asignatura es conveniente que los alumnos repasen y actualicen los conocimientos generales de Química, Física y Matemáticas que hayan adquirido durante su etapa preuniversitaria.

Objetivos

• **Generales:**

Describir y analizar la estructura y propiedades de la materia condensada en función de las relaciones espaciales entre átomos y de las interacciones entre ellos.

• **Específicos:**

Conocer las bases conceptuales, principios básicos y aspectos epistemológicos de la Cristalografía; analizar el concepto de cristal en el contexto de la teoría reticular y de la simetría; deducir los grupos de simetría puntual y su relación con la morfología de los cristales; comprender la relación entre la simetría espacial y el ordenamiento interno de los cristales; conocer los fundamentos teóricos y prácticos de la difracción de rayos-X por los cristales; caracterizar los principales modelos de estructuras y clasificar los cristales desde el punto de vista estructural; introducir el concepto de cristal real y describir los principales defectos cristalinos y sus consecuencias sobre la dinámica cristalina.

Competencias y destrezas teórico-prácticas a adquirir por el alumno:

Conocimiento general, actualizado e integrador de la Cristalografía como ciencia básica, de interés científico y aplicado en Química; visión espacial tridimensional y representación gráfica de los cristales; metodología y técnicas de análisis de la materia cristalina por difracción de rayos-X; identificación y cuantificación de fases cristalinas; análisis de estructuras y cálculos cristalográficos.

Contribución al desarrollo de habilidades y destrezas genéricas:

Capacidad de análisis y síntesis de datos, resolución de problemas, capacidad para aplicar la teoría a la práctica, habilidades de investigación y capacidad de aprendizaje, utilización de instrumentos, lenguajes y fuentes de documentación, planificación y desarrollo de trabajos cooperativos.

Metodología

- **Número total de horas de trabajo del estudiante:** 150 horas
- **Número total de horas presenciales:** 47 horas (32 de clases teóricas y 15 de clases prácticas)
- **Otras actividades académicamente dirigidas:** 13 horas (incluye seminarios, realización de trabajos teórico-prácticos y visita a un centro de instrumentación científica).
- **Resto hasta completar el número total de horas:** 90 horas (incluye tutorías individuales, preparación y realización de exámenes, preparación de actividades programadas, realización de prácticas sin presencia del profesor, etc.).

Técnicas docentes

- **Sesiones académicas teóricas:** La lección magistral se utilizará para presentar a los alumnos la parte doctrinal de la asignatura, aportando una información esencial, bien organizada y procedente de diversas fuentes, que facilite la comprensión y el aprendizaje. Como recursos didácticos se emplearán la tradicional pizarra junto con proyecciones de diapositivas y transparencias. Eventualmente se utilizarán recursos informáticos para facilitar la intelección de los conceptos de más difícil comprensión y desarrollar la visión espacial tridimensional de las estructuras cristalinas.
- **Sesiones académicas prácticas:** Las prácticas de la asignatura tienen como finalidad complementar y aplicar los conocimientos teóricos, e incluyen trabajos de gabinete y de laboratorio tales como estudio de modelos periódicos y sólidos cristalográficos, análisis de grupos de simetría espaciales y lectura e interpretación de diagramas de rayos-X.
- **Actividades académicas dirigidas:** Se propondrá la realización y exposición de actividades prácticas, tutorizadas por el profesor, que tienen como finalidad fomentar el aprendizaje cooperativo mediante trabajos que ayuden a complementar los contenidos impartidos en las sesiones teóricas y prácticas.
- **Entrevistas personales o tutorías:** El alumno recibirá una orientación personalizada y recomendaciones para superar las dificultades de aprendizaje derivadas de las lecciones magistrales.
- **Seminarios:** Serán sesiones académicas abiertas, diseñadas por el profesor e incluso por los propios alumnos, que permitirán la resolución interactiva de un problema concreto, o bien la discusión de un tema específico, con el objetivo de fomentar el debate, participación, motivación y capacidad expositiva de los alumnos.
- **Visitas:** Se prevé una visita a la Unidad de Difracción de Rayos-X de los Servicios Centrales de I+D de la Universidad de Huelva.

Bloques temáticos

- I. Espacio reticular y simetría cristalina
- II. Radiocristalografía y análisis estructural
- III. Cristalquímica y dinámica cristalina
- IV. Formación y crecimiento de cristales

Competencias a adquirir por Bloques Temáticos

Bloque I: Conocimiento de los fundamentos de la Teoría Reticular y de la Simetría

Bloque II: Introducción a los métodos y técnicas de difracción de rayos-X y al análisis estructural de los cristales

Bloque III: Aplicaciones de los principios fundamentales de la Cristalografía y aproximación al concepto de cristal real dinámico.

Bloque IV: Comprensión de los procesos de nucleación y crecimiento de cristales

Bibliografía

• Fundamental

AMOROS, J.L. (1990). El Cristal: Morfología, Estructura y Propiedades Físicas. Atlas (4ª ed.) Madrid.

WOOLFSON, M.M. (1997). An Introduction to X-Ray Crystallography. Cambridge Univ. Press (2ª ed.)

BLOSS, F.D. (1994). Crystallography and Crystal Chemistry. Mineralogical Society of America (2ª ed.) Washington.

ORDÓÑEZ, S. y otros (2000). Introducción a la Cristalografía Práctica. Universidad de Alicante

RUIZ, M.D. (2002). Cristalografía Elemental para Químicos. Ágora, Málaga

TILLEY, R.J.D. (2006). Crystals and Crystal Structures. John Wiley & Sons, Chichester

• Complementaria

AMIGÓ, J.M. y otros (1981). Cristalografía. Rueda, Madrid.

BORCHARDT.OTT, W. (1995). Crystallography. Springer, Berlin.

GIACOVAZZO, C. (2002). Fundamentals of Crystallography (2nd ed.). Oxford University Press

HAMMOND C. (1997). The Basics of Crystallography and Diffraction. Oxford Univ. Press

KELLY, A. GROVES, G.W. & KIDD, P. (2000). Crystallography and Crystal Defects. John Wiley & Sons, Chichester.

MAK, T.C.W. (1997). Crystallography in Modern Chemistry: A Resource Book of crystal Structures. John Wiley & Sons, New York.

RODRÍGUEZ GALLEGO, M. (1982). La Difracción de Rayos-X. Alhambra, Madrid.

VAINSTEIN, B.K. (1994). Modern Crystallography. Vols. I y II. Springer-Verlag, Berlin.

• Evaluación

El sistema de evaluación estará basado en las siguientes actividades:

a) Un examen final con una parte teórica y otra práctica, que versarán sobre el temario propuesto. La nota de este examen representará el 80% de la calificación final de la asignatura, si bien para superar el curso se requiere una nota mínima de 4 en este apartado.

b) Los trabajos presentados en relación con los contenidos de la asignatura, especialmente el trabajo práctico y otras actividades académicas dirigidas. La nota de estas actividades representará el 20% de la calificación final.

Organización docente semanal (cronograma)

Actividad	Semana													
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Bloques temáticos	I	I			I	I	II	II	II	II			III	IV
Nº de horas (32)	3	3			3	3	3	3	3	3			4	4
Temas de prácticas														
Nº de horas (15)	Ver calendario de prácticas de la titulación													
Actividades académicas dirigidas (13)			3	3							1	3	3	

Programa docente

• Temario de Teoría

Tema 1: INTRODUCCION

Cristalografía. Desarrollo histórico. Bases conceptuales. Subdivisiones y relaciones con otras ciencias. Interés y aplicaciones en Química.

Tema 2: TEORIA RETICULAR

Periodicidad cristalina. Modelos periódicos. Celda unidad. Constantes y notaciones reticulares. Relación entre elementos reticulares y morfológicos del cristal. Leyes fundamentales de la Cristalografía Morfológica.

Tema 3: PRINCIPIOS DE SIMETRÍA CRISTALINA

Simetría Cristalina. Operaciones básicas y elementos de simetría. Clases de operaciones de simetría.

Tema 4: SIMETRÍA PUNTUAL

Agrupaciones de elementos de simetría puntual. Combinaciones permitidas. Restricciones que impone la periodicidad. Los 32 grupos de simetría puntual. Formas cristalinas.

Tema 5: SIMETRÍA ESPACIAL

Efecto de la traslación sobre la simetría puntual. Ejes helicoidales. Planos de deslizamiento. Simetría del espacio reticular. Redes planas. Redes tridimensionales.

Tema 6: CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS-X

Naturaleza de los rayos-X. Espectro continuo y característico. Interacción de los rayos-X con la materia. Detección.

Tema 7: DIFRACCIÓN DE RAYOS-X POR LOS CRISTALES

Teoría general de la difracción de los rayos-X por una red cristalina. Ecuaciones de Laüe. Ley de Bragg. Red recíproca. Esfera de Ewald. Intensidad de los haces difractados. Factor atómico. Factor de estructura.

Tema 8: MÉTODOS EXPERIMENTALES DE DIFRACCIÓN DE RAYOS-X

Métodos de cristal único. Método de Laüe. Métodos de cristal giratorio. Método de polvo cristalino. Difractómetro de polvo. Aplicaciones analíticas.

Tema 9: ANÁLISIS ESTRUCTURAL

Determinación de una estructura cristalina. Cálculo de las constantes reticulares. Determinación del grupo espacial. Determinación de las posiciones atómicas.

Tema 10: MODELOS ESTRUCTURALES

Principios de Cristalografía. Estructuras moleculares. Estructuras metálicas. Estructuras covalentes. Estructuras iónicas. Relación de radios y poliedros de coordinación. Reglas de Pauling. Empaquetamientos cristalinos y huecos poliédricos. Clasificación estructural de los cristales.

Tema 11: IMPERFECCIONES CRISTALINAS

El cristal real. Tipos de imperfecciones cristalinas. Defectos puntuales. Defectos lineales. Defectos planares. Defectos tridimensionales.

Tema 12: DINAMICA CRISTALINA

Variaciones composicionales: Isomorfismo y soluciones sólidas. Variaciones estructurales: Polimorfismo y transformaciones polimórficas.

Tema 13: FORMACIÓN Y CRECIMIENTO DE CRISTALES

Cristalogenésis. Nucleación y crecimiento cristalino. Estructura atómica de las superficies cristalinas. Relación entre mecanismos de crecimiento y morfología cristalina. La morfología cristalina como indicador genético.

• Temario de Prácticas

I. Estudio de modelos periódicos y notaciones reticulares

Estudio de los elementos reticulares de un cristal y referenciación de su posición espacial mediante notaciones convencionales (parámetros de Weiss e índices de Miller).

II. Estudio de grupos puntuales

Reconocimiento de elementos de simetría puntual. Relación del grupo de simetría puntual con la morfología externa. Asignación del grupo puntual de simetría.

III. Estudio de grupos espaciales

Determinación de las propiedades de simetría de los grupos espaciales y su relación con el ordenamiento interno de los cristales. Representación espacial de estructuras sencillas.

IV. Estudio de modelos de estructuras

Tipos de empaquetamientos cristalinos y de huecos poliédricos. Relaciones de coordinación. Cálculos cristalográficos.

- **Actividades académicas dirigidas**

I. Proyección estereográfica de cristales

Construcción de un goniómetro de contacto. Medida de ángulos interfaciales. Proyección estereográfica de los elementos morfológicos y elementos de simetría de un cristal.

II. Difracción de rayos-X

Cálculo de ángulos de difracción y espaciados interplanares. Asignación de índices de Miller. Determinación de la red cristalina. Cálculo de parámetros reticulares. Análisis por difracción de rayos-X (método de polvo) de muestras monofásicas y mezclas sencillas. Identificación de fases. Comparación entre difractogramas teóricos y observados.