



DATOS IDENTIFICATIVOS

Geología: Geología

Asignatura	Geología: Geología			
Código	V11G200V01205			
Titulación	Grado en Química			
Descriptor	Creditos ECTS	Selección	Curso	Cuatrimestre
	6	FB	1	2c
Lengua	Castellano			
Impartición				
Departamento	Geociencias marinas y ordenación del territorio			
Coordinador/a	Gago Duport, Luís Carlos			
Profesorado	Gago Duport, Luís Carlos			
Correo-e	duport@uvigo.es			
Web	http://faitic.uvigo.es			
Descripción general	<p>El estudio de la estructura de la materia en estado cristalino, objetivo de la Cristalografía, es de relevancia para la comprensión de los fenómenos más diversos, en el ámbito de la Química. Consecuentemente, el planteamiento de la Geología de primer curso del grado en Química está preferentemente orientado hacia el conocimiento y caracterización de las estructuras cristalinas y de los mecanismos de cristalización que se abordan desde el punto de vista de la Cristalografía, la Mineralogía y la Geoquímica. De manera particular, las técnicas de difracción se han convertido en las más difundidas entre los investigadores químicos para la caracterización y determinación de estructuras de las más diversas sustancias: materiales superconductores, minerales, compuestos orgánicos, inorgánicos, productos farmacéuticos, macromoléculas biológicas, y materiales cerámicos, entre otros, por ello en el curso se sientan, desde un punto de vista introductorio e intuitivo, las bases de la difracción y se muestran las principales técnicas experimentales asociadas al proceso de caracterización de sólidos cristalinos.</p>			

Competencias

Código	
C1	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: aspectos principales de la terminología química, nomenclatura, conversiones y unidades.
C14	Demostrar conocimiento y comprensión de hechos esenciales, conceptos, principios y teorías en: relación entre propiedades macroscópicas y propiedades de átomos y moléculas individuales, incluyendo las macromoléculas
C27	Monitorizar, mediante observación y medida de propiedades físicas y químicas, sucesos o cambios y documentarlos y registrarlos de manera sistemática y fiable
D1	Comunicarse de forma oral y escrita en al menos una de las lenguas oficiales de la Universidad
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Buscar y gestionar información procedente de distintas fuentes
D5	Utilizar las tecnologías de la información y de las comunicaciones y manejar herramientas informáticas básicas
D7	Aplicar los conocimientos teóricos a la práctica
D8	Trabajar en equipo
D9	Trabajar de forma autónoma
D12	Planificar y gestionar adecuadamente el tiempo
D13	Tomar decisiones
D14	Analizar y sintetizar información y obtener conclusiones
D15	Evaluar de modo crítico y constructivo su entorno y a sí mismo

Resultados de aprendizaje

Resultados previstos en la materia	Resultados de Formación y Aprendizaje
3. Comprender las bases de la cristalografía geométrica como medio para la caracterización estructural de los sólidos cristalinos, incluyendo los conceptos básicos como periodicidad y simetría.	D1 D3 D5 D9 D12

5. Conocer los aspectos básicos de la notación cristalográfica y su aplicación a la caracterización tanto de la simetría en las moléculas (Schoenflies) como a la caracterización estructural de los cristales (Hermann-Mauguin).	C1	D1 D7 D8 D13 D14 D15
6. Entender los principios básicos de la difracción como técnica para el análisis estructural y los conceptos cristalográficos asociados: Ley de Bragg, celda recíproca, problema de las fases.	C1 C14	D1 D3 D5 D9 D15
10. Entender los procesos de intercambio isotópico en sólidos cristalinos y conocer sus aplicaciones para la medida del tiempo geológico y como marcadores de condiciones termodinámicas y cinéticas.	C1	D1 D4 D5 D15
7. Adquirir un conocimiento básico sobre los principios para la determinación estructural mediante diagramas de difracción de rayos.		D1 D4 D5 D9 D15
6. Entender los principios básicos de la difracción como técnica para el análisis estructural y los conceptos cristalográficos asociados: Ley de Bragg, celda recíproca, problema de las fases.	C1	D1 D5 D7 D15
5. Conocer los aspectos básicos de la notación cristalográfica y su aplicación a la caracterización tanto de la simetría en las moléculas (Schoenflies) como a la caracterización estructural de los cristales (Hermann-Mauguin).	C1	D1 D5 D7 D14 D15
1. Conocer y comprender, la cristalización como un proceso de transición de fase, diferenciando las etapas de nucleación y crecimiento cristalino.	C1	D1 D3 D9 D14 D15
8. Conocer de forma básica la información derivada de las distintas técnicas de difracción : R-X, electrones, neutrones y sus principales aplicaciones en el ámbito de la ciencia de materiales y de la caracterización molecular.	C1	D14 D15
9. Adquirir una experiencia práctica en el manejo de programas de difracción y en la interpretación de imágenes de microscopía electrónica diferenciado la información estructural (HREM, SAED) y morfológica (SEM).	C1 C27	D1 D4 D5 D8 D15
1. Conocer y comprender, el funcionamiento de la Tierra como sistema.	C1	D1 D3 D9 D12 D15
2. Ser capaz de caracterizar la interacción entre los diferentes reservorios, los procesos físicos, químicos y biológicos involucrados así como las diferentes escalas espacio-temporales asociadas.	C1	D1 D4 D7 D9 D13 D15
(*)	C1	D1 D3 D7 D8 D14 D15
(*)	C1	D1 D3 D4 D7 D15

Contenidos

Tema

El proceso de cristalización	Aspectos termodinámicos de la nucleación y crecimiento cristalino. Cinética del crecimiento cristalino. Factores estructurales asociados.
Los sólidos cristalinos	Estructura cristalina. Aspectos microscópicos. Morfología cristalina: aspectos macroscópicos.
Conceptos básicos de cristalografía geométrica	Periodicidad y simetría. Redes bidimensionales. Grupos de simetría puntual. Notaciones de Schoenflies y Hermann-Mauguin.
Redes tridimensionales	Grupos espaciales. Índices de Miller. Coordenadas fraccionarias y ejes de zona.
Cristalografía de rayos X	La red recíproca. Transformada de Fourier y difracción en el espacio recíproco.
Técnicas de difracción	Métodos de monocristal y de polvo. Espectros de difracción de rayos X: Ley de Bragg. Esfera de Ewald. Factor de estructura. El problema de la fase.
Interpretación de espectros de difracción	Análisis de diagramas de difracción de polvo. Determinación estructural mediante microscopía electrónica de alta resolución (HREM). Métodos de caracterización de materiales no cristalinos.
Algunas aplicaciones de las técnicas de difracción	Caracterización de materiales cerámicos y aleaciones. Determinación de la estructura de proteínas. Análisis textural de materiales amorfos y muestras biológicas. Seguimiento en tiempo real de transiciones de fase.
Crecimiento de cristales en medios naturales	Biomíneralización. Ambientes evaporíticos. Modelos de predicción de precipitación de fases cristalinas.
Geocronología	Isótopos radiactivos. Estabilidad nuclear. Mecanismos de descomposición. Vida media. Sistemas de datación temporal: K-Ar, Rb-Sr, Sm-Nd, U-Th-Pb, ¹⁴ C. Otros métodos de datación: huellas de fisión.
Isótopos estables en Geología	Relación isotópica. Factores que determinan el fraccionamiento isotópico. Aplicaciones como marcadores cinéticos y termodinámicos de procesos geoquímicos.

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Trabajos tutelados	2	13	15
Sesión magistral	26	52	78
Resolución de problemas y/o ejercicios	13	26	39
Otros	0	14	14
Pruebas de tipo test	4	0	4

*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

Metodologías

	Descripción
Trabajos tutelados	Son trabajos que realiza cada alumno de manera individual y consistirán en la caracterización cristalográfica de una sustancia cristalina en los aspectos estructurales, composicionales y morfológicos. Adoptan el formato de un pequeño trabajo de investigación y llevan implícito el conocimiento y manejo de los conceptos y nomenclatura explicados en las clases teóricas y seminarios.
Sesión magistral	Se explican los principios básicos de la cristalización como proceso y de las estructuras de los sólidos cristalinos a partir de las ideas de periodicidad y simetría de las redes cristalinas. Se introduce al alumno a las técnicas de difracción.
Resolución de problemas y/o ejercicios	Se emplearán los seminarios para la preparación de trabajos prácticos asociados al proceso de crecimiento de cristales. y se trabajará con programas de resolución de estructuras mediante difracción y microscopía electrónica
Otros	Se realizarán presentaciones por grupos con para exponer los resultados y principales conclusiones de los trabajos desarrollados por grupos acerca de los procesos de crecimiento cristalino. y caracterización estructural

Atención personalizada

Metodologías	Descripción
Trabajos tutelados	Estos trabajos se realizarán durante los seminarios utilizando programas cristalográficos en los que ese emplee la notación de simetría de Herman-Mauguin empleada en Cristalografía
Resolución de problemas y/o ejercicios	Se desarrollarán en el aula de informática, durante los seminarios, empleando programas de edificación de rayos X y mediante el tratamiento de imágenes de microscopio electrónica de transmisión (HREM).
Otros	Se desarrollarán en el aula de informática y en clase teórica así como mediante la realización de tutorías o consultas empleando la plataforma Tema o el correo electrónico.

Evaluación				
	Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje	
Trabajos tutelados	Se valorará que los conceptos explicados en la teoría sean empleados correctamente, así como la notación y nomenclatura cristalográfica. También aspectos como la coherencia en el desarrollo del trabajo y la precisión en las medidas y en la cuantificación de los resultados.	10	C1 C14 C27	D1 D3 D4 D5 D7 D8 D12 D13 D14
Resolución de problemas y/o ejercicios	Se valorará el grado de aprendizaje obtenido mediante los trabajos prácticos asociados a la actividad realizada durante los seminarios	30	C1 C27	D3 D7 D9 D14 D15
Otros	Se valorará la exposición de las conclusiones obtenidas en los seminarios realizados acerca de la resolución de estructuras	20	C1	D1 D4 D8 D14
Pruebas de tipo test	se evaluará el grado de comprensión de los conceptos y definiciones cristalográficos, asociados a la parte teórica.	40	C1 C14	D1 D9 D14

Otros comentarios sobre la Evaluación

La evaluación en la segunda convocatoria consistirá en la realización de un ejercicio teórico acerca de los conceptos básicos de la Cristalografía y su aplicación a la resolución de estructuras, desarrollados durante las clases magistrales. Asimismo, será necesario realizar un ejercicio práctico en el manejo de las herramientas informáticas para el análisis de estructuras cristalinas empleadas durante el curso.

Fuentes de información

Bibliografía Básica

Andrew Putnis, **Introduction to Mineral Sciences**, 1ª,

Robert A. Evarestov, V.P. Smirnov, **Site symmetry in crystals : theory and applications**, 2ª,

Bibliografía Complementaria

Edward Tarbuck y FredericK Lutgens, **Ciencias de la Tierra. Una introducción a la Geología Física**, 8ª,

Christofer Hammond, **The Basic of Crystallography and Diffraction**, 3ª,

Jose Luis Amorós, **El Cristal : morfología, estructura y propiedades físicas**, 4ª,

Rousseau, J.-J., **Basic crystallography**,

Vitalij K. Pecharsky, Peter Y. Zavalij, **Fundamentals of powder diffraction and structural characterization of materials**,

Douglas, Bodie E., **Structure and chemistry of crystalline solids**, 1ª,

Woolfson, M. M., **An Introduction to X-ray crystallography**, 2ª,

Salvador Galí Medina, **Cristalografía : teoría particular, grupos puntuales y grupos espaciales**, 1ª,

Recomendaciones

Asignaturas que continúan el temario

Química inorgánica I/V11G200V01404

Determinación estructural/V11G200V01501

Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente

Física: Física II/V11G200V01201

Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203

Química, física y geología: Laboratorio integrado II/V11G200V01202

Química: Química II/V11G200V01204

Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

Biología: Biología/V11G200V01101

Física: Física I/V11G200V01102

Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104

Química, física y biología: Laboratorio integrado I/V11G200V01103

