

DATOS IDENTIFICATIVOS				
Xeoloxía: Xeoloxía				
Materia	Xeoloxía: Xeoloxía			
Código	V11G200V01205			
Titulación	Grao en Química			
Descritores	Creditos ECTS	Sinale	Curso	Cuadrimestre
	6	FB	1	2c
Lingua de impartición	Castelán			
Departamento	Xeociencias mariñas e ordenación do territorio			
Coordinador/a	Gago Duport, Luís Carlos			
Profesorado	Gago Duport, Luís Carlos			
Correo-e	duport@uvigo.es			
Web	http://faitic.uvigo.es			
Descrición xeral	O estudo da estrutura da materia en estado cristalino, obxectivo da *Cristalografía, é de relevancia para a comprensión dos fenómenos máis diversos, no ámbito da Química. Consecuentemente, a formulación da Xeoloxía de primeiro curso do grao en Química está preferentemente orientado cara ao coñecemento e caracterización das estruturas cristalinas e dos mecanismos de *cristalización que se abordan desde o punto de vista da *Cristalografía, a Mineraloxía e a *Geoquímica. De maneira particular, as técnicas de *difracción convertéronse nas máis difundidas entre os investigadores químicos para a caracterización e determinación de estruturas das máis diversas sustancias: materiais superconductores, minerais, compostos orgánicos, inorgánicos, produtos farmacéuticos, *macromoléculas biolóxicas, e materiais *cerámicos, entre outros, por iso no curso sentan, desde un punto de vista *introductorio e *intuitivo, as bases da *difracción e móstranse as principais técnicas experimentais asociadas ao proceso de caracterización de sólidos cristalinos.			

Competencias	
Código	
C1	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: aspectos principais da terminoloxía química, nomenclatura, conversións e unidades
C14	Demostrar coñecemento e comprensión de feitos esenciais, conceptos, principios e teorías en: relación entre propiedades macroscópicas e propiedades de átomos e moléculas individuais, incluíndo as macromoléculas
C27	Monitorizar, mediante observación e medida de propiedades físicas e químicas, acontecementos ou cambios e documentalos e rexistralos de xeito sistemático e fiable
D1	Comunicarse de forma oral e escrita en polo menos unha das linguas oficiais da Universidade
D3	Aprender de forma autónoma
D4	Procurar e administrar información procedente de distintas fontes
D5	Utilizar as tecnoloxías da información e das comunicacións e manexar ferramentas informáticas básicas
D7	Aplicar os coñecementos teóricos á práctica
D8	Traballar en equipo
D9	Traballar de forma autónoma
D12	Planificar e administrar adecuadamente o tempo
D13	Tomar decisións
D14	Analizar e sintetizar información e obter conclusións
D15	Avaliar de modo crítico e construtivo o entorno e a si mesmo

Resultados de aprendizaxe	
Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe
3. Comprender as bases da *cristalografía xeométrica como medio para a caracterización estrutural dos sólidos cristalinos, incluíndo os conceptos básicos como periodicidade e *simetría.	D1 D3 D5 D9 D12

5. Coñecer os aspectos básicos da notación *cristalográfica e a súa aplicación á caracterización tanto da *simetría nas moléculas (*Schoenflies) como á caracterización estrutural dos cristais (*Hermann-*Mauguin).	C1	D1 D7 D8 D13 D14 D15
6. Entender os principios básicos da *difracción como técnica para a análise estrutural e os conceptos *cristalográficos asociados: Lei de *Bragg, cela *recíproca, problema das fases.	C1 C14	D1 D3 D5 D9 D15
10. Entender os procesos de intercambio *isotópico en sólidos cristalinos e coñecer as súas aplicacións para a medida do tempo xeolóxico e como marcadores de condicións termodinámicas e *cinéticas.	C1	D1 D4 D5 D15
7. Adquirir un coñecemento básico sobre os principios para a determinación estrutural mediante *diagramas de *difracción de raios.		D1 D4 D5 D9 D15
6. Entender os principios básicos da *difracción como técnica para a análise estrutural e os conceptos *cristalográficos asociados: Lei de *Bragg, cela *recíproca, problema das fases.	C1	D1 D5 D7 D15
5. Coñecer os aspectos básicos da notación *cristalográfica e a súa aplicación á caracterización tanto da *simetría nas moléculas (*Schoenflies) como á caracterización estrutural dos cristais (*Hermann-*Mauguin).	C1	D1 D5 D7 D14 D15
1. Coñecer e comprender, a *cristalización como un proceso de transición de fase, diferenciando as etapas de *nucleación e crecemento cristalino.	C1	D1 D3 D9 D14 D15
8. Coñecer de forma básica a información derivada das distintas técnicas de *difracción : *R-*X, electróns, neutróns e as súas principais aplicacións no ámbito da ciencia de materiais e da caracterización molecular.	C1	D14 D15
9. Adquirir unha experiencia práctica no manexo de programas de *difracción e na interpretación de imaxes de microscopía electrónica diferenciado a información estrutural (*HREM, *SAED) e morfolóxica (*SEM).	C1 C27	D1 D4 D5 D8 D15
1. Coñecer e comprender, o funcionamento da Terra como sistema.	C1	D1 D3 D9 D12 D15
2. Ser capaz de caracterizar a interacción entre os diferentes *reservorios, os procesos físicos, químicos e biolóxicos involucrados así como as diferentes escalas espazo-temporais asociadas.	C1	D1 D4 D7 D9 D13 D15
(*)	C1	D1 D3 D7 D8 D14 D15
(*)	C1	D1 D3 D4 D7 D15

Contidos

Tema

O proceso de *cristalización	Aspectos termodinámicos da *nucleación e crecemento cristalino. *Cinética do crecemento cristalino. Factores estruturais asociados.
Os sólidos cristalinos	Estrutura cristalina. Aspectos *microscópicos. Morfoloxía cristalina: aspectos *macroscópicos.
Conceptos básicos de *cristalografía xeométrica	Periodicidade e *simetría. Redes *bidimensionales. Grupos de *simetría puntual. Notacións de *Schoenflies e *Hermann-*Mauguin.
Redes *tridimensionales	Grupos espaciais. Índices de Miller. Coordenadas *fraccionarias e eixos de zona.
*Cristalografía de raios X	A rede *recíproca. Transformada de *Fourier e *difracción no espazo *recíproco.
Técnicas de *difracción	Métodos de *monocristal e de po. Espectros de *difracción de raios X: Lei de *Bragg. Esfera de *Ewald. Factor de estrutura. O problema da fase.
Interpretación de espectros de *difracción	Análise de *diagramas de *difracción de po. Determinación estrutural mediante *microscopia electrónica de alta resolución (*HREM). Métodos de caracterización de materiais non cristalinos.
Algunhas aplicacións das técnicas de *difracción	Caracterización de materiais *cerámicos e aliaxes. Determinación da estrutura de proteínas. Análise *textural de materiais *amorfos e mostras biolóxicas. Seguimento en tempo real de transicións de fase.
Crecemento de cristais en medios naturais	*Biomineralización. Ambientes *evaporíticos. Modelos de predición de precipitación de fases cristalinas.
*Geocronología	Isótopos radioactivos. Estabilidade nuclear. Mecanismos de descomposición. Vida media. Sistemas de *datación temporal: *K-*Ar, *Rb-*Sr, *Sm-*Nd, Ou-*Th-Pb, 14*C. Outros métodos de *datación: pegadas de fisión.
Isótopos estables en Xeoloxía	Relación *isotópica. Factores que determinan o *fraccionamiento *isotópico. Aplicacións como marcadores *cinéticos e termodinámicos de procesos *geoquímicos.

Planificación

	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Traballo tutelado	2	13	15
Lección maxistral	26	52	78
Resolución de problemas	13	26	39
Outros	0	14	14
Probas de tipo test	4	0	4

*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientador, considerando a heteroxeneidade do alumnado.

Metodoloxía docente

	Descrición
Traballo tutelado	Son traballos que realiza cada alumno de maneira individual e consistirán na caracterización *cristalográfica dunha sustancia cristalina nos aspectos estruturais, *composicionales e morfolóxicos. Adoptan o formato dun pequeno traballo de investigación e levan implícito o coñecemento e manexo dos conceptos e nomenclatura explicados nas clases teóricas e seminarios.
Lección maxistral	Explícanse os principios básicos da *cristalización como proceso e das estruturas dos sólidos cristalinos a partir das ideas de periodicidade e *simetría das redes cristalinas. Introdúcese ao alumno ás técnicas de *difracción.
Resolución de problemas	Empregaranse os seminarios para a preparación de traballos prácticos asociados ao proceso de crecemento de cristais. e se *tabajara con programas de *resolucion de estruturas mediante *difraccion e microscopía *electronica
Outros	Realizaranse presentacións por grupos con para expor os resultados e *principlaes conclusións dos traballos desenvolvidos por grupos acerca dos procesos de crecemento cristalino. e caracterización estrutural

Atención personalizada

Metodoloxías	**Descrición**
Traballo tutelado	Estes traballos realizaranse durante os seminarios utilizando programas *cristalográficos nos que ese empregue a notación de *simetría de *Herman-*Mauguin empregada en *Cristalografía
Resolución de problemas	Desenvolvésense na aula de informática, durante os seminarios, empregando programas d edificación de raios X e mediante o tratamento de imaxes de microscopio electrónica de transmisión (*HREM).
Outros	Desenvolveranse na aula de informática e en case teórica así como mediante *l realización de *tutorías ou consultas empregando a plataforma Tema ou o correo electrónico.

Avaliación

	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe	
Traballo tutelado	Valorarase que os conceptos explicados na teoría sexan empregados correctamente, así como a notación e nomenclatura *cristalográfica. Tamén aspectos como a coherencia no desenvolvemento do traballo e a precisión nas medidas e na cuantificación dos resultados.	10	C1 C14 C27	D1 D3 D4 D5 D7 D8 D12 D13 D14
Resolución de problemas	Valorarase a realización de traballos prácticos realizados por grupos durante os seminarios	30	C1 C27	D3 D7 D9 D14 D15
Outros	Valorarase a exposición en grupos das conclusións obtidas nos traballos realizados nos seminarios acerca da resolución de estruturas	20	C1	D1 D4 D8 D14
Probas de tipo test	avaliarase o grao de comprensión dos conceptos e definicións *cristalográficos, asociados á parte teórica.	40	C1 C14	D1 D9 D14

Outros comentarios sobre a Avaliación

&*lt;*p&*gt;A avaliación na segunda convocatoria consistirá na realización dun exercicio teórico&*amp;*nbsp;acerca de&*amp;*nbsp;os conceptos básicos da *Cristalografía e a súa aplicación á resolución de estruturas, desenvolvidos durante&*amp;*nbsp;as clases&*amp;*nbsp; maxistrais. Así mesmo, será&*amp;*nbsp;necesario realizar un exercicio práctico no manexo de as&*amp;*nbsp;ferramentas informáticas para a análise de estruturas cristalinas empregadas durante o curso.&*lt;/*p&*gt;

Bibliografía. Fontes de información

Bibliografía Básica

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

Robert A. Evarestov, V.P. Smirnov, **Site symmetry in cristals : 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,

Recomendacións

Materias que continúan o temario

Química inorgánica I/V11G200V01404
Determinación estrutural/V11G200V01501

Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Física: Física II/V11G200V01201
Matemáticas: Matemáticas II/V11G200V01203
Química, física e xeoloxía: Laboratorio integrado II/V11G200V01202
Química: Química II/V11G200V01204

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Bioloxía: Bioloxía/V11G200V01101
Física: Física I/V11G200V01102
Matemáticas: Matemáticas I/V11G200V01104
Química, física e bioloxía: Laboratorio integrado I/V11G200V01103