

**Proyecto/Guía docente de la asignatura Adaptada a la Nueva Normalidad**

Esta guía ha sido elaborada teniendo en cuenta a todos los profesores de la asignatura. Se ajusta a la máxima presencialidad posible del estudiante, respetando siempre las capacidades de los espacios asignados por la Facultad de Ciencias y justificando todas las adaptaciones que se realicen respecto a la memoria de verificación.

Asignatura	Síntesis y Caracterización Estructural de los Materiales		
Materia	Optativa		
Módulo			
Titulación	Grado en Física		
Plan	469	Código	45756
Periodo de impartición	2º Cuatrimestre	Tipo/Carácter	Optativa (OP)
Nivel/Ciclo	2º curso	Curso	Segundo
Créditos ECTS	6 ECTS		
Lengua en que se imparte	Castellano		
Profesor/es responsable/s	A. Carmelo Prieto Colorado y Javier Pinto Sanz		
Datos de contacto (E-mail, teléfono...)	angelcarmelo.prieto@uva.es ; 983423193 jpinto@fmc.uva.es ; 983186314		
Departamento	Física de la Materia Condensada, Cristalografía y Mineralogía		

1. Situación / Sentido de la Asignatura

1.1 Contextualización

Se contextualiza esta asignatura a través de la ficha del programa Verifica aprobada por la ANECA correspondiente al Grado en Física, que se recoge en la Figura 1. Esta ficha y sus contenidos son el auténtico “contrato” que el Área de Cristalografía y Mineralogía asume con la Universidad de Valladolid, a través de la Sección de Físicas, para impartir su encargo docente en el Grado en Física. Todo lo que sigue a continuación, no es otra cosa que el desarrollo de este contrato. Se señalan los requisitos previos, las competencias transversales y específicas, las actividades formativas presenciales y no presenciales, con su temporización en valores ECTS, las habilidades resultado del aprendizaje que se pretenden, el sistema de evaluación y los contenidos generales de la asignatura.

Denominación de la asignatura: (Codificación o numeración y nombre) Síntesis y caracterización estructural de materiales			
1	Créditos ECTS:	Carácter:	FB: Formación Básica; OB: Obligatoria; OP: Optativa; TF: Trabajo Fin de Carrera; PE: Prácticas externas; MX: Mixto
	6	OP	
2	Descripción de la ubicación dentro del plan de estudios así como sobre su duración:		
	Para ser impartida después del primer curso. Curso cuatrimestral de 60 horas lectivas en aula (clases de teoría y de problemas) y laboratorio.		
3	Requisitos previos:		
	Haber cursado las asignaturas de Fundamentos de Física de primer curso.		
4	Competencias: (Indicar las competencias que se desarrollan, de las descritas en el punto 3.2.)		
	T1, T2, T3, T4, T5, T6, T7, T8, T9 E3, E4, E5, E6, E8, E10, E11, E12, E13, E14, E15.		
5	Actividades formativas con su contenido en ECTS, su metodología de enseñanza y aprendizaje y su relación con las competencias a desarrollar:		
	Actividades presenciales	ECTS	Trabajo personal del alumno
	Clases de teoría en aula	1.60	Estudio autónomo y resolución de problemas
	Clases de problemas en aula	0.40	Preparación y redacción de trabajos y ejercicios
	Trabajo en laboratorio	0.40	Redacción de informes de laboratorio
	Clases en aula de informática	0	Búsquedas bibliográficas
	Tutorías, seminarios y presentación de trabajos	0.32	
	Sesiones de evaluación	0.08	
	Total presencial:	2.80	Total personal: 3.20
5.1	Resultados de aprendizaje:		
	<ul style="list-style-type: none"> - Comprender y dominar los conceptos básicos relacionados con la estructura de la materia (estructura estática y estructura dinámica). - Comprender los diferentes métodos de determinación estructural - Dominar en particular, los métodos derivados de la difracción y de la espectroscopia vibracional - Manejar las técnicas asociadas con los métodos de determinación estructural - Comprender y dominar los conceptos básicos asociados con la formación y crecimiento de los cristales - Dominar los métodos principales de síntesis de los materiales y los métodos principales de crecimiento cristalino 		
6	Sistemas de evaluación:		
	Combinación ponderada de evaluación continua, valoración del cuaderno de laboratorio, informes de las prácticas y prueba final de examen.		
7	Contenidos de la asignatura: (Breve descripción de la asignatura)		
	Estructura estática y dinámica de la materia. Métodos de determinación estructural. Bases cristalográficas. Técnicas de difracción. Técnicas espectroscópicas. Síntesis y crecimiento cristalino: aplicaciones.		
8	Comentarios adicionales: (Cualquier aspecto, no descrito en los apartados anteriores)		

Figura 1. Ficha del Programa Verifica / ANECA de la asignatura "Síntesis y Caracterización Estructural de los Materiales" del Grado en Física de la Universidad de Valladolid.

1.2 Relación con otras materias

Se relaciona con las materias del Grado en Física enmarcadas en Ciencia de Materiales, de caracterización estructural y espectroscópicas.

1.3 Prerrequisitos

Conocimientos básicos de teoría de grupos matemáticos y manejo correcto de formulación y conceptos elementales de química.

2. Competencias

2.1 Generales

- Capacidad de análisis y síntesis, (T1).
- Capacidad de organización y planificación, (T2).
- Comunicación oral y escrita, (T3).
- Capacidad de resolución de problemas, (T4).
- Trabajo en equipo, (T5).
- Capacidad de gestión de la información, (T6).
- Capacidad de trabajo y aprendizaje autónomo, (T7).
- Capacidad de adaptación a nuevas situaciones, (T8).
- Creatividad, (T9).

2.2 Específicas

- E3: Ser capaz de comparar nuevos datos experimentales con modelos disponibles para revisar su validez y sugerir cambios con el objeto de mejorar la concordancia de los modelos con los datos.
- E4: Ser capaz de iniciarse en nuevos campos a través de estudios independientes.
- E5: Ser capaz de evaluar claramente los ordenes de magnitud, de desarrollar una clara percepción de las situaciones que son físicamente diferentes, pero que muestran analogías y, por lo tanto, permiten el uso de soluciones conocidas a nuevos problemas.
- E6: Ser capaz de realizar las aproximaciones requeridas con el objeto de reducir un problema hasta un nivel manejable.
- E8: Ser capaz de buscar y utilizar bibliografía en Física y otra bibliografía técnica, así como cualquier fuente de información relevante para trabajos de investigación y desarrollo técnico de proyectos.
- E10: Ser capaz de mantenerse informado de los nuevos desarrollos.
- E11: Adquirir familiaridad con las fronteras de la investigación.
- E12: Tener una buena comprensión de las teorías físicas más importantes, de su estructura lógica y matemática y su soporte experimental.
- E13: Ser capaz de integrar los conocimientos recibidos de las diferentes áreas de la Física para la resolución de un problema.
- E14: Haberse familiarizado con los modelos experimentales más importantes, y ser capaz de realizar experimentos de forma independiente, así como describir, analizar y evaluar críticamente los datos experimentales.
- E15: Comprender y dominar el uso de los métodos matemáticos y numéricos más comúnmente utilizados.

3. Objetivos

Tal y como se describe en la ficha de la asignatura, una vez cursada la asignatura, el alumno debe haber conseguido:

- Comprender y dominar los conceptos básicos relacionados con la estructura de la materia (estructura estática y estructura dinámica).
- Conocer los modelos estructurales tipo.
- Manejar los elementos geométricos de la red.
- Comprender los diferentes métodos de determinación estructural.
- Dominar en particular, los métodos derivados de la difracción y de la espectroscopia vibracional.
- Manejar las técnicas asociadas con los métodos de determinación estructural.



- Comprender y dominar los conceptos básicos asociados con la formación y crecimiento de los cristales.
- Conocer los métodos principales de síntesis de los materiales y de crecimiento cristalino.

Por tanto, “Síntesis y caracterización estructural de los materiales”, pretende dotar al egresado en Física de los conocimientos necesarios para abordar con éxito su presencia en el eje profesional relacionado con el diseño, análisis y caracterización de nuevos materiales. La correlación entre la estructura estática, la estructura dinámica y las propiedades estructurales de los materiales -objetivos fundamental de la Ciencia de Materiales-, será el eje conductor del programa propuesto en esta asignatura, situando a los físicos en un espacio propio, entre la Química y la Ingeniería. Para ello, se dota a los estudiantes del Grado en Física de conocimientos sobre síntesis, técnicas de caracterización y de determinación estructural de nuevos y avanzados materiales.

4. Contenidos y/o bloques temáticos

Los contenidos de la asignatura “Síntesis y caracterización estructural de los materiales”, están agrupados en seis bloques temáticos:

- Estructura estática y dinámica de la materia.
- Bases cristalográficas.
- Métodos de determinación estructural.
- Técnicas de difracción.
- Técnicas espectroscópicas.
- Síntesis y crecimiento cristalino: aplicaciones.

Bloque 1: “Estructura estática y dinámica de la materia”

Tema 1.	El estado sólido: concepto macroscópico y microscópico de cristal. Red cristalina y motivo estructural. Orden espacial. Parámetros de orden. Periodicidad. Orden y periodicidad: sólidos cristalinos. Orden sin periodicidad: cuasicristales y fractales. Ni orden y ni periodicidad: sólidos amorfos. Entre el orden y el desorden: cristales líquidos y sólidos parcialmente cristalinos.
Tema 2.	Energía de cohesión de los cristales. Interacciones atómicas en los sólidos cristalinos. Enlace Químico: tipos. Modelo estático: estructura cristalina promedio. Modelo dinámico: Estructura dinámica del cristal.
Tema 3.	Descripción de la estructura cristalina. Principios generales de la clasificación de estructuras: empaquetados densos y otros tipos estructurales. Empaquetamiento cúbico (ccp). Empaquetamiento hexagonal (hcp).
Tema 4.	Materiales con estructuras de empaquetamiento: Metales, Aleaciones, Cristales iónicos, Cristales covalentes, Cristales moleculares. Otros tipos de empaquetamiento: Empaquetamiento tetragonal. Modelos poliédricos de empaquetamiento. Estructuras típicas de empaquetamiento: NaCl, ZnS (escalera y wurzita), Na ₂ O, NiAs, CsCl, y otras estructuras AX. Estructuras tipo TiO ₂ , CdI ₂ , CdCl ₂ y Cs ₂ O. Espinelas y ferritas. Estructura de los silicatos.
Tema 5.	Estructura dinámica. Vibraciones atómico – moleculares. Coordenadas de movimiento. Modos Normales de Vibración (MNV): frecuencias fundamentales

Carga de trabajo en créditos ECTS:

Bloque 2: “Bases Cristalográficas”

Tema 6.	El cristal como medio periódico: Aspectos internos. Redes mono-, bi-y tridimensionales. Propiedades del motivo: la celda. Tipos de celda. Representación vectorial.
Tema 7.	Propiedades de la Red. Elementos geométricos de la red. Notación de los elementos geométricos de la red. Coeficientes de Weiss. Índices de Miller. Zonas cristalográficas. Ejes de zona. Espaciado reticular. Densidad reticular. Red recíproca. Parámetros recíprocos. Propiedades de la red recíproca. Zonas de Dirichlet y Brillouin.
Tema 8.	La simetría. Operaciones de simetría. Elementos de Simetría. Propiedades de los elementos de Simetría. Representaciones de las operaciones de Simetría. Operaciones propias e impropias.
Tema 9.	Asociación de elementos de simetría: Noción de grupo matemático. Simetría puntual: Grupos puntuales de simetría en dos y tres dimensiones. Símbolos de los grupos puntuales.
Tema 10.	Simetría Traslacional. Restricciones a la simetría puntual impuesta por la red. Redes de Bravais. Redes primitivas y centradas. Simetría de las redes de Bravais en dos y tres dimensiones. Sistemas cristalinos. Ejes helicoidales y planos de deslizamiento.
Tema 11.	Grupos espaciales bidimensionales: Grupos planos. Grupos espaciales tridimensionales. Símbolos de los Grupos espaciales. Aplicaciones a una, dos y tres dimensiones. Posiciones equivalentes especiales y generales. Nomenclatura (Tablas internacionales de Cristalografía).

Carga de trabajo en créditos ECTS:

Bloque 3: “Métodos de determinación estructural”

Tema 12.	Interacción Radiación – Materia. Determinación de la estructura estática (Métodos de difracción). Resolución de la estructura dinámica (Métodos espectroscópicos).
----------	--

Carga de trabajo en créditos ECTS:

**Bloque 4: "Técnicas de difracción"**

- Tema 13. Los rayos X. Producción y espectro de los rayos X. Proceso físico de la difracción de los rayos X. Condiciones generales de la difracción: Ecuaciones de Laue y Ley de Bragg. Relación entre las condiciones de Laue y la ley de Bragg. Condiciones geométricas de la difracción: Esfera de Ewald.
- Tema 14. Intensidad de la Difracción. Dispersión de los rayos X por un electrón. Dispersión de los rayos-X por un átomo. Factor de difusión atómico. Dispersión de la radiación por una distribución de átomos. Factor de estructura. Factores de corrección de la intensidad integrada.
- Tema 15. Simetría del diagrama de difracción y su relación con la simetría puntual del cristal. Ley de Friedel. Grupos de Laue. Extinciones sistemáticas debidas a las redes. Extinciones sistemáticas debidas a elementos de simetría traslacional. Determinación del grupo espacial de simetría. Símbolos de difracción. Fundamentos en los que se basa la determinación de estructuras cristalinas.
- Tema 16. Técnicas de monocristal. El difractómetro de monocristales. Método de Laue. Método de cristal giratorio. Método de cristal oscilante. Método de Weissenberg. Método de precesión de Buerger.
- Tema 17. Técnicas de polvo cristalino. El difractómetro de polvo y las cámaras de Debye-Sherrer. Métodos de medida de intensidades. Asignación de índices. Determinación de los valores de los parámetros cristalinos (Sistemas cúbico, tetragonal, rómbico y hexagonal). Determinación del número de moléculas por celda unidad. Densidad radiocristalográfica. Identificación de sustancias cristalinas. Archivo de datos ASTM. Análisis cuantitativo de fases cristalinas.
- Tema 18. Otros métodos de difracción. Difracción de neutrones. Difracción de electrones. Radiación sincrotrón. Microscopía electrónica de transmisión (TEM) con alta resolución. Aplicaciones.

Carga de trabajo en créditos ECTS: **Bloque 5: "Técnicas espectroscópicas"**

- Tema 19. Espectroscopía vibracional. Fundamento molecular de la espectroscopía. Fenómenos de absorción y de dispersión de la radiación por la materia. Teoría de Grupos aplicada a la espectroscopía. Reglas de Selección: IR y Raman. Número y simetría de los modos normales de vibración (MNV). Predicción de los MNV mediante métodos teóricos "ab initio".
- Tema 20. Espectroscopía vibracional de absorción Infrarroja. Introducción. Interacción materia-IR. Instrumentación. Tratamiento de espectros IR. Espectroscopía mediante A.T.R. Preparación de las muestras. Espectroscopía IR de reflexión difusa (DRIFT).. Aplicaciones de la espectroscopía infrarroja.
- Tema 21. Espectro de dispersión Raman. Introducción-Historia del Efecto Raman. Fundamentos. Teoría semiclásica. Relaciones de dispersión. Reglas de selección. Variantes de espectroscopía Raman. Información que proporciona la técnica instrumental. Similitudes y diferencias entre las espectroscopías IR y Raman. Ejemplos de aplicación.
- Tema 22. Espectroscopía óptica: Ultravioleta – Visible. Espectroscopía de ruptura dieléctrica asistida por láser: LIBS. Espectroscopía de Dispersión de Brillouin. Espectroscopía de Fluorescencia de Rayos X. Espectroscopía de Rayos X por dispersión de Energía.

Carga de trabajo en créditos ECTS: **Bloque 6: "Síntesis y Crecimiento cristalino: Aplicaciones"**

- Tema 23. Formación y crecimiento cristalino. Concepto de cristalización. Su importancia en la actividad industrial. Aspectos termodinámicos de la cristalización. Regla de las fases de Gibbs. Diagrama de fases. Sistemas monocomponentes: ejemplos. Sistemas multicomponentes: sistemas binarios y ternarios: ejemplos. Sistemas sólido-líquido: Curvas de solubilidad y de sobresaturación. Mecanismos de la cristalización. Nucleación. Crecimiento cristalino
- Tema 24. Síntesis y preparación de Cristales. Crecimiento de Monocristales a Baja Temperatura. Crecimiento a partir de soluciones. Crecimiento en medio gel. Crecimiento de Monocristales a partir de Vapor. Transporte químico en fase vapor (CVP). Transporte físico en fase vapor (PVD). Crecimiento de Monocristales a partir de Fundido. Crecimiento sin utilización de crisol. Zona Flotante. Método de Verneuil. Método Skull. Crecimiento con desplazamiento del crisol. Crecimiento sin desplazamiento del crisol. Crecimiento Hidrotermal.
- Tema 25. Síntesis y preparación de películas delgadas: Métodos físicos. Evaporación en vacío. Calentamiento por filamento o banda metálica. Calentamiento por inducción. Pulverización catódica o «sputtering». Haces de iones. Deposición por haces moleculares.
- Tema 26. Síntesis y preparación de películas delgadas: Métodos químicos. Deposición química en Fase vapor. Oxidación Térmica. Métodos electroquímicos. Electrodeposición. Anodización. Deposición a partir de soluciones químicas.
- Tema 27. Síntesis de materiales de dimensiones reducidas. Introducción: top-down vs bottom-up. ¿Por qué materiales de baja dimensión? El estudio y manipulación de los materiales de baja dimensión: el desarrollo del AFM. Rutas de fabricación de materiales de dimensiones reducidas. Otras ejemplos de la manipulación de la materia a escala atómica.

Carga de trabajo en créditos ECTS:



a. Contextualización y justificación

Síntesis y caracterización estructural de los materiales, pretende dotar al egresado en física de los conocimientos necesarios para abordar con éxito su presencia en el eje profesional relacionado con el diseño, análisis y caracterización de nuevos materiales. La correlación entre la estructura estática, la estructura dinámica y las propiedades estructurales de los materiales -objetivo fundamental de la Ciencia de Materiales-, es el eje conductor del programa propuesto en la asignatura, situando a los físicos en un espacio propio, entre la Química y la Ingeniería. Para ello, se dota a los estudiantes del Grado en Física de conocimientos sobre síntesis, técnicas de caracterización y de determinación estructural de nuevos y avanzados materiales.

b. Objetivos de aprendizaje

- Comprender y dominar los conceptos básicos relacionados con la estructura de la materia (estructura estática y estructura dinámica).
- Conocer los modelos estructurales tipo.
- Manejar los elementos geométricos de la red.
- Comprender los diferentes métodos de determinación estructural.
- Dominar en particular, los métodos derivados de la difracción y de la espectroscopia vibracional.
- Manejar las técnicas asociadas con los métodos de determinación estructural.
- Comprender y dominar los conceptos básicos asociados con la formación y crecimiento de los cristales.
- Conocer los métodos principales de síntesis de los materiales y de crecimiento cristalino.

c. Contenidos

- Estructura estática y dinámica de la materia.
- Bases cristalográficas.
- Métodos de determinación estructural.
- Técnicas de difracción.
- Técnicas espectroscópicas.
- Síntesis y crecimiento cristalino: aplicaciones.

d. Métodos docentes

La metodología docente se basa en la combinación de las siguientes herramientas:

- Clases de teoría
- Supuestos prácticos en aula
- Tutorías en grupo
- Trabajos prácticos de laboratorio
- Visitas guiadas a Laboratorios de investigación y/o empresas
- Trabajo en equipo
- Realización de presentaciones públicas orales de los trabajos de prácticas

e. Plan de trabajo

- Exposición y desarrollo de los fundamentos teóricos
- Realización de supuestos prácticos para conocer los modelos estructurales tipo, manejar los elementos geométricos de la red.
- Determinación de elementos de simetría, grupos de simetría puntual y espacial en figuras repetitivas 1, 2 y 3 dimensionales.
- Exposición de casos prácticos relevantes de determinación estructural y análisis vibracional
- Experiencias de difracción de rayos-X, DRX.
- Experiencias de espectroscopia infrarroja, FTIR-ATR
- Experiencias Raman en modo macroscópico
- Experiencias Raman en modo microscópico
- Determinación de parámetros difractométricos y espectroscópicos y tratamiento de señal.
- Trabajo practico en equipo: Caso de estudio sobre materiales avanzados

**f. Evaluación**

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Examen teórico / práctico	6 (3+3) puntos	Conocimiento de contenidos, resolución de supuestos prácticos y de cuestiones.
Problemas propuestos en el aula	0,5 puntos	Se realizarán de forma aleatoria, a lo largo del curso. Algunos pueden coincidir con las horas de seminario.
Trabajo en laboratorio	3 puntos	Entrega del cuaderno - informe experimental del trabajo desarrollado en el laboratorio
Tutorías de grupo, seminarios y visitas a laboratorios	0,5 puntos	Se realizarán de forma aleatoria, a lo largo del curso, coincidentes con las horas de tutorías de grupo.

g. Bibliografía básicaEstructura estática y dinámica de la materia

- Ashcroft, N.W., Mermin, N.D., "Solid State Physics", Internacional Edition, 1976.
- Brown, F.C., "Física de los Sólidos", Reverté, 1970.
- Callister, W.D. "Introducción a la Ciencia e Ingeniería de los materiales", Reverté, 1995.
- Dorlot, J.M., Baillon, J.P., Masounave, J., "Des Matériaux", Editions de l'école polytechnique de Montreal, 1986.
- Elliot, S.R., "The physics and chemistry of solids", John Wiley & Sons, 1998.
- Kittel, C., "Introducción a la Física del estado sólido". Reverté, Barcelona, 1995.
- Mercier, J.P., Zambelli, G., Kurz, W., "Introduction to material Science", Elsevier, 2002.
- Saja, J.A. de, "Introducción a la Física de los Materiales". Universidad de Valladolid, 2000.
- Saja, J.A. de, Rodríguez-Pérez, M.A., Rodríguez-Méndez, M.L., "Materiales: Estructura, Propiedades y aplicaciones", Thomson Paraninfo, 2005.
- Saackelford, J.F., "Introducción a la Ciencia de Materiales para Ingenieros", Prentice Hall, 1998.
- Vainshtein, B.K., Fridkin, V.M., Indenbom, V.L., "Modern Crystallography II: Structure of Crystals". Springer Series in Solid-State Sciences. Vol. 21. Springer-Verlag, Berlin, 1982.
- West, A.R., "Solid State Chemistry and applications", John Wiley & Sons, 1984.

Bases cristalográficas

- Amoros, J.L., "El cristal. Una introducción al estado sólido". Ucrania, S.A. Barcelona, 1982.
- Bishop, D.M., "Group theory and Chemistry", Dover Public. Inc. New-York, 1993.
- Borchardt-Ott, W. "Crystallography", Springer, 1995.
- Cotton, F.A., "La teoría de grupos aplicada a la química". Limusa, Mexico, 1977.
- Cuevas, M.A., Galí, S., Solans, J., Calvet, M.T., Vendrel, M., Solans, F.X., Labrador, M., Nogués, J.M., "Problemas de cristalografía", U.B., Barcelona, 2002.
- Elliot, S.R., "The physics and chemistry of solids", John Wiley & Sons, 1998.
- Fuentes, L.E., Fuentes, M.E., "Cristales y policristales", Reverté, 2008.
- Gali, S., "Cristalografía: teoría reticular, grupos puntuales y grupos espaciales", PPU, 1992.
- Sands, D.E., "Introducción a la Cristalografía." Reverté, Barcelona. 1975
- Sodre, F., "Elementos de Cristalografía", Fundação Galouste Gulbenkian, Lisboa 1996.
- Vainshtein, B.K., "Modern Crystallography I. Symetry of Crystals, Methods of Structural Crystallography". Vol.15. Springer-Verlag, Berlin, 1981.
- Weigel, D., "Cristallographie et Structure des Solides (I)". Mason et Cie., 1972.

Métodos de determinación estructural

- Putnis, A., "Introduction to mineral sciences", Cambridge University Press, 1992.
- Rull, F. "Espectroscopia IR y Raman de Cristales y Minerales", Universidad de Valladolid, 1993.
- Clegg, W., "Crystal Structure Determination", Oxford University Press, 1998.

Técnicas de difracción

- Bermúdez, J. "Métodos de difracción de Rayos X: principios y aplicaciones", Ediciones Pirámide, Madrid 1981.
- Hammond, C., "The basics of crystallography and diffraction", Oxford University Press, 2000.



- Kittel, C., "Introducción a la Física del estado sólido". Reverté, Barcelona, 1984.
- Rodríguez Gallego, M. "La difracción de los Rayos X", Alhambra, Madrid 1982.
- Saja, J.A. de, "Difracción por muestras policristalinas. Método de Debye Scherrer". I.C.E., Valladolid, 1978.
- Warren, B.E., "X-ray diffraction", Dover Public. Inc. New-York, 1990.

Técnicas espectroscópicas

- Aroca, R., "Surface-Enhanced Vibrational Spectroscopy", Wiley online library, 2006.
- Bristoti, A., Nicola, J.H., "Aplicações da teoria de grupos na espectroscopia de Raman e do infravermelho", Secretaria-Geral da Organizaçao dos Estados Americanos. Washington, 1980.
- Chang, R., "Principios básicos de espectroscopía", AC, Madrid, 1977.
- Farmer V.C. "The infrared spectra of minerals", Mineralogical Society, London 1974.
- Ferraro, J.R., Nakamoto, K., "Introductory Raman Spectroscopy", Academia Press, 1999.
- Jiménez, J., de Wolf, I., Landesman, J.P., "MicroRaman spectroscopy: Fundamentals and applications" in Microprobe characterization of semiconductors. Serie Optoelectronic properties of semiconductors and superlattices, Vol. 17-2, Taylor and Francis, New York, 2002.
- Jiménez, J., Tomm, J.M., "Spectroscopic Analysis of Optoelectronic Semiconductors", Springer Series in Optical Sciences. Vol. 202, Springer, 2016.
- Long, D.A., "Raman Spectroscopy". McGraw Hill, New-York, 1977.
- Nakamoto, K., "Infrared and Raman Spectra of inorganic and coordination compounds", Part A, John Wiley & Sons, 1997.
- Poulet, H., Mathieu, J.P., "Spectres de vibration et symetrie des cristaux". Gordon and Breach, New York, 1970.
- Rull F. "Espectroscopia IR y Raman de Cristales y Minerales", Universidad de Valladolid, 1993.
- Rull F. "The Raman Effect and the vibrational dynamics of molecules and crystalline solids" in EMU Notes in Mineralogy - volume 12. "Applications of Raman spectroscopy to Earth sciences and cultural heritage (J. Dubessy, MC. Caumon and F. Rull, editors), ISBN: 978-0-903056-31-1, 2012.
- Sócrates, G., "Infrared and Raman characteristic group frequencies", John Wiley & Sons, 2001.
- Turrel G., Corset, J. "Raman microscopy: Development and applications", Academic Press, London, 1996.

Síntesis y crecimiento cristalino: aplicaciones

- Albella, J.M., Cintas, A.M., Miranda, T., Serratos, J.M., "Introducción a la Ciencia de Materiales", C.S.I.C., Madrid, 1993.
- Coronas, J., "La cristalización como proceso de separación", Prensas Universitarias de Zaragoza, 2007.
- Elliot, S.R., "The physics and chemistry of solids", John Wiley & Sons, 1998.
- Grases, F., Costa, A., Söhnel, O., "Cristalización en disolución: conceptos básicos", Reverte, 2000.
- Heinz K.H., "Crystal growth in gels", Dover Publications, New-York, 1996.
- Jackson, K.A., "Kinetic processes: crystal growth, diffusion, and phase transitions in materials", Wiley-VCH, 2004.
- Jones, A.G., "Crystallization process systems", Butterworth-Heinemann, 2002.
- Harkov, I.V., "Crystal growth for beginners: fundamentals of nucleation, crystal growth and epitaxy", World Scientific, 1996.
- Mersmann, A., "Crystallization technology handbook", Marcel Dekker, 2001.
- Mullin, J.W., "Crystallization", Butterworth-Heinemann, 2001.
- Ohtaki, H., "Crystallization processes", John Wiley & Sons, 1998.
- Tiller, W.A., "The science of crystallization: macroscopic phenomena and defect", Cambridge University Press, 1991.
- Tiller, W.A., "The science of crystallization: microscopic interfacial phenomena", Cambridge University Press, 1995.
- West, A.R., "Solid State Chemistry and applications", John Wiley & Sons, 1984.

h. Recursos necesarios

- Aula equipada con cañón de proyección y conexión a internet.
- Equipo automático de difracción de rayos-X.
- Equipo de espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier con reflectancia total atenuada.
- Equipo portable de espectroscopía Raman
- Espectroscopía Raman de alta resolución
- Paquetes informáticos para la determinación de grupos de simetría puntual y espacial en 1, 2 4 dimensiones.
- Paquetes informáticos para la determinación de parámetros difractométricos, espectroscópicos y de tratamiento de señal.



Los profesores responsables de la asignatura, además de las horas y lugares reglados de tutorías, estarán disponible para los alumnos, previa cita, en las direcciones de correo electrónico siguientes: angelcarmelo.prieto@uva.es; y jpinto@fmc.uva.es. Se organizarán sesiones conjuntas de tutorías para discutir los aspectos críticos de la asignatura.

i. Temporalización

CARGA / ECTS	PERIODO PREVISTO DE DESARROLLO
Bloques Temáticos 1-6 / 2 ECTS	Segundo Cuatrimestre de lunes a viernes en aula y horario determinado por el Decanato de la Facultad de Ciencias
Supuestos prácticos de laboratorio	En mayo de 2022 de 10:00 a 14:00 horas en el Laboratorio LO1 del Aulario del Campus "Miguel Delibes" y/o en los Laboratorios del Departamento
Trabajos de grupo y emisión de Informes	Previo al día 01/06/2022

5. Métodos docentes y principios metodológicos

El desarrollo del curso pretende estar impregnado por una dinámica muy activa y participativa y menos magistral. Se trata de atender el aprendizaje considerándole una dimensión muy importante dentro de la enseñanza universitaria, tradicionalmente más preocupada por transmitir conocimientos que por forjar actitudes y desarrollar capacidades.

Clases de teoría y de problemas en aula.

Por lo anteriormente expuesto, las clases magistrales o de teoría presenciales en aula se basarán en clases expositivas (lecciones magistrales o lectures) para la exposición y desarrollo de los fundamentos teóricos, y clases prácticas de problemas en aula, más participativas, en las que se resolverán ejercicios y problemas. En todos los casos que así lo requieran se utilizarán aquellas TICs que favorezcan la comprensión y participación de los alumnos.

Los alumnos dispondrán en la pagina web de la Universidad, <https://campusvirtual.uva.es/> en el apartado correspondiente a la asignatura, de toda la información básica requerida: créditos ECTS, competencias que contribuye a desarrollar, objetivos y resultados de aprendizaje, contenidos, principios metodológicos y métodos docentes, criterios y sistemas de evaluación, recursos de aprendizaje y apoyo tutorial, calendario y horario, tabla de dedicación del estudiante a la asignatura, plan de trabajo, responsables de la docencia e idioma en que se imparte. A ello se añadirán colecciones de textos, presentaciones, problemas propuestos y problemas tipo resueltos, tipos de exámenes, ejercicios a desarrollar, enlaces de interés, y cuantas aportaciones de carácter didáctico permitan al alumno obtener las competencias y habilidades propuestas.

Para las clases de problemas en aula se han diseñado tres unidades didácticas correspondientes a tres de los bloques temáticos descritos en el programa de clases teóricas de aula. Evidentemente, tienen un carácter práctico y los principales hitos a considerar en cada unidad se detallan a continuación.

Propiedades de Simetría

- Determinación de los elementos geométricos de la red.
- Determinación de parámetros reticulares, celda de Bravais y motivo estructural.
- Estimación de los elementos de simetría de la red.
- Grupos puntuales y espaciales.

Técnicas Espectroscópicas

- Cálculo de constantes de fuerza de los enlaces y frecuencias de los modos normales de vibración.
- Interpretación de tablas de caracteres y desarrollo de las representaciones reducible e irreducible para moléculas con distintos grupos puntuales de simetría.
- Interpretación e identificación de espectros IR y Raman.

Difracción de rayos-X

- Calculo de las condiciones de Difracción.
- Condiciones de difracción para el método de Laüe.
- Condiciones de Difracción para el método del polvo cristalino.
- Intensidad de los rayos difractados.
- Interpretación de difractogramas de Debye-Scherrer.
- Determinación de los parámetros reticulares. Determinación de la Red Reciproca.

**Trabajos de laboratorio.**

Uno de los aspectos positivos que introduce el nuevo grado es la presencialidad en laboratorios. Los alumnos realizarán al menos dos trabajos prácticos de los tres que proponemos a continuación.

- **Síntesis y caracterización de cristales obtenidos en solución acuosa.** Sobre los cristales obtenidos se efectuarán las siguientes actuaciones.
 - Obtención de curvas de solubilidad y sobresaturación.
 - Obtención e Indexación del Difractograma de polvo.
 - Obtención y análisis del Espectro de absorción IR y de difusión Raman.

El material de laboratorio y equipamiento instrumental del Área de Cristalografía y Mineralogía y del Departamento cubren todas las necesidades de infraestructura necesarias para realizar las prácticas. Se dispone de:

- Baños termostáticos para determinación de curvas de solubilidad y sobresaturación.
- Estufas de crecimiento cristalino en solución acuosa.
- Microscopios estereoscópicos y petrográficos, con iluminación visible y ultravioleta.
- Difractómetros de polvo y Laue.
- Espectrómetros FTIR-ATR.
- Espectrómetros Raman y Raman microscópico.

Parte de las experiencias se desarrollan con equipos instrumentales sofisticados pertenecientes a los grupos de investigación del Departamento.

Los alumnos tendrán que entregar los correspondientes informes relativos a los trabajos prácticos realizados, y llevar un cuaderno de seguimiento de actividades y toma de notas relativas a la actividad realizada en el día a día del laboratorio. Dado que será difícil encontrar tiempo suficiente para organizar al final de las prácticas sesiones donde cada alumno o grupo de alumnos presentará los resultados de sus trabajos de laboratorio en presencia de todos los alumnos, se coordinará esta actividad de modo que pueda realizarse esta parte dentro de las tutorías de grupo. Este ejercicio permitirá a los alumnos practicar en la realización de presentaciones orales y manejar estructuras y recurso de las TICs.

Para finalizar se han programado tres visitas guiadas a diferentes laboratorios de investigación relacionados con la síntesis y/o caracterización de materiales, que, al ser parte estructural del Área, del Departamento o de la Universidad presentan una relativa facilidad de acceso y pueden ser planificadas las visitas en correlación al avance del temario de clases de teoría y de problemas.

- **Visita guiada a laboratorios:**
 - Unidad de Microscopía avanzada del Parque Científico Universidad de Valladolid.
 - Unidad de Investigación Consolidada de Castilla y León UIC051 "GdS-Optronlab".
 - Laboratorios de los grupos CellMat y AHMAT.

Eventualmente se podrán ampliar las visitas guiadas a empresas emblemáticas regionales o nacionales ligadas al campo de Ciencia y Tecnología de Materiales.

Tutorías personales, tutorías en grupo, seminarios, presentación de trabajos y plataformas virtuales.

La ficha VERIFICA de la asignatura indica para estas actividades presenciales (tutorías personales y en grupo, seminarios y presentación de trabajos) 0.32 ECTS, lo que supone 8 horas de actividad con carácter presencial.

Dentro del EEES las tutorías presenciales juegan un papel importante de cara a, por un lado, ayudar al estudiante a resolver las dudas que pueda tener, y por otro a motivarle a realizar un seguimiento de la asignatura diario. Es importante señalar que pueden constituirse en un instrumento que sirva como elemento motivador. Así pues, en las tutorías personales se mantendrán y servirán para atender de forma personalizada las cuestiones o dudas particulares de cada uno de los alumnos, relativas a la asignatura. Los horarios están prefijados al comienzo del curso y además el alumno dispone de línea directa mediante correo electrónico con el profesor para concertar cuantas entrevistas precise. En la página web de la Universidad <http://www.uva.es/>, con entradas a través de diversos campos, existe el desglose de las horas, días y lugares en que cada profesor del departamento atiende las tutorías personales y/o grupales.

Respecto a las tutorías en grupo, dado el bajo número de estudiantes presumibles en esta asignatura optativa al menos en los próximos años, se podrán realizar con el grupo completo, utilizándose para:

- Resolver las dudas que puedan surgir en el seguimiento de la asignatura.
- Resolver parte de los ejercicios propuestos en las clases de problemas de aula.
- Cada bloque didáctico de la asignatura conllevará la entrega a los alumnos de un breve cuestionario (para resolver en 30 minutos) que servirá para que se autoevalúen y sepan el nivel de conocimientos adquiridos.

Estos cuestionarios se recogerán y servirán como medida del seguimiento y evaluación continuada de la asignatura por cada estudiante. Estas tres actividades tienen como objetivo ayudar al estudiante a realizar un mejor seguimiento de autocontrol de la asignatura.

Además, se impartirán al menos dos seminarios por curso, uno por parte de un experto en síntesis de materiales, a ser posible que trabaje en la parte tecnológica o industrial de Ciencia de Materiales, y otro por parte de un investigador en el campo de los Materiales. Estos seminarios junto con las visitas previstas a los laboratorios de investigación, tendrán como función prioritaria la motivación del alumno para ese campo científico y tecnológico. Finalmente, los estudiantes presentarán, sus trabajos oralmente al resto de la clase, lo que permitirá por un lado practicar en este tipo de ejercicio y utilizar recursos de las TIC y por otro conocer algo más las diversas áreas de investigación en materiales que se desarrollan en el área de Conocimiento y en el Departamento de Física de la Materia Condensada, Cristalografía y Mineralogía.

6. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura

ACTIVIDADES PRESENCIALES	HORAS	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORAS
Clases de teoría en aula	40	Estudio autónomo y resolución de problemas	50
Clases de problemas en aula	10	Preparación y redacción de trabajos y ejercicios	15
Trabajo en laboratorio	10	Redacción de informes de laboratorio	10
Tutorías, seminarios y presentación de trabajos	8	Búsquedas bibliográficas	5
Sesiones de evaluación	2		
Total presencial	70	Total no presencial	80

7. Sistema y características de la evaluación

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Examen teórico / práctico	6 (3+3) puntos	Conocimiento de contenidos, resolución de supuestos prácticos y de cuestiones.
Problemas propuestos en el aula	0,5 puntos	Se realizarán de forma aleatoria, a lo largo del curso. Algunos pueden coincidir con las horas de seminario.
Trabajo en laboratorio	3 puntos	Entrega del cuaderno - informe experimental del trabajo desarrollado en el laboratorio
Tutorías, seminarios y actividades	0,5 puntos	Se realizarán de forma aleatoria, a lo largo del curso, coincidentes con las horas de tutorías de grupo.

CRITERIOS DE CALIFICACIÓN

- **Convocatoria ordinaria:** Combinación ponderada de evaluación continua con presentación de trabajos tutelados, valoración del trabajo de laboratorio, informes de las prácticas y prueba final de examen.
- **Convocatoria extraordinaria:** Prueba práctica con resolución de supuestos experimentales y prueba final de examen

8. Consideraciones finales

Las clases de teoría en aula tienen 1.6 ECTS, lo que en horas de carga presencial se traduce en 40 horas totales. La Tabla I, recoge la estimación de tiempos de dedicación presencial del alumno a los Problemas de Aula y Trabajos de Laboratorio, planificados en esta programación. De modo similar a las clases de problemas en aula, los trabajos de laboratorio, tutorías, seminarios, presentación de trabajos y sesiones de evaluación les corresponden 0.40, 0.40, 0.32, y 0.08 ECTS, respectivamente. La información existente en el presente proyecto/guía docente



constituye una directriz para el profesor. Debe considerarse como un guión lo suficientemente flexible para poder adaptarse a la realidad del aula, de los alumnos y del centro en el momento de su impartición, atendiendo a las necesidades o intereses del alumnado. El sistema de calificación, la temporalización de las sesiones y la distribución de los contenidos y actividades son orientativos, pudiendo modificarse en función del desarrollo de la asignatura y de la implicación y participación del alumnado

Bloque Temático	HORAS	ECTS	HORAS TOTALES
Estructura estática y dinámica de la materia	4-5	1,6	40
Bases Cristalográficas	6-7		
Métodos de determinación estructural	10		
Técnicas espectroscópicas	10		
Síntesis y Crecimiento cristalino: Aplicaciones.	10-8		
Problemas de Aula: Propiedades de simetría	2	0,4	10
Problemas de Aula: Microscopia óptica	3		
Problemas de Aula: Difracción de rayos-X	5		
Trabajos en laboratorio	8	0,4	10
Visita guiada a laboratorios	2		
Total	60	2,4	60