

## 60456 - Cristalografía y técnicas de difracción

### Información del Plan Docente

**Año académico:** 2023/24

**Asignatura:** 60456 - Cristalografía y técnicas de difracción

**Centro académico:** 100 - Facultad de Ciencias

**Titulación:** 543 - Máster Universitario en Química Molecular y Catálisis Homogénea

**Créditos:** 2.0

**Curso:** 1

**Periodo de impartición:** Segundo semestre

**Clase de asignatura:** Optativa

**Materia:**

### 1. Información básica de la asignatura

El objetivo de esta asignatura es habilitar al alumno para reconocer el potencial de las diferentes técnicas de difracción en el marco de cualquier investigación, básica o aplicada, en el ámbito de la Química, y poder ser capaz de seguir el proceso de medida y tratamiento posterior de los datos hasta la obtención de la información estructural.

La comprensión de los conceptos fundamentales asociados a las técnicas de difracción debe contribuir a la formación del alumno de manera que éste disponga de criterio autónomo para acudir a estas metodologías ante determinados problemas de identificación o caracterización de muestras en el ámbito académico o en el entorno empresarial. La información estructural que se obtiene a través de los estudios experimentales por difracción resulta básica en el establecimiento de relaciones estructura/actividad muy poderosas, que permiten progresar en la racionalización de procesos químicos muy diversos.

Las actividades de aprendizaje previstas en esta asignatura contribuirán al logro de las metas 3.b, 4.3, 4.4, 6.3, 7a, 8.2, 9.4, 9.5, 11.4, 12.2, 12.4 de los ODS de la Agenda 2030.

### 2. Resultados de aprendizaje

Asimilar los conceptos fundamentales de simetría espacial, mostrando una comprensión adecuada de su nomenclatura y de su aplicación a la Cristalografía.

Manejar con criterio los conceptos implicados en el proceso de difracción y, en especial, en la interrelación entre los resultados experimentales de los procesos de difracción y la estructura interna de los cristales.

Conocer los métodos experimentales más comunes para la realización de diagramas de difracción, tanto para muestras en polvo, como para muestras monocristalinas. Entender los requerimientos fundamentales de las muestras para ser susceptibles de ser estudiadas por difracción de rayos X.

Conocer los procedimientos adecuados para la determinación de estructuras moleculares a partir de datos de difracción.

Interpretar las principales características de los diagramas de difracción y evaluar la calidad de los datos obtenidos.

Procesar los datos de difracción para la obtención de la información estructural requerida, a nivel cristalino o bien a nivel molecular.

Interpretar los resultados estructurales obtenidos de los experimentos.

Conocer la existencia y los requerimientos experimentales básicos para otros procesos de determinación estructural basados en la difracción de otras radiaciones distintas de los rayos X.

### 3. Programa de la asignatura

1. Estructura/Propiedad: paradigma de la ciencia moderna. ¿Qué es la Cristalografía estructural?. Experimentos de difracción.
2. Simetría espacial. Grupos espaciales. Nomenclatura. Tablas Internacionales.
3. Rayos X y otras radiaciones. Equipamiento científico para la difracción.
4. Estructura cristalina y difracción. Reflexiones e intensidades. Ley de Bragg, red recíproca y factor de estructura.
5. El tratamiento de datos de difracción. El refinamiento de estructuras tridimensionales. Estructuras absolutas.
6. Presentación y validación de resultados. Contextualización de datos estructurales.
7. Experimentos de difracción sobre muestras policristalinas. Aplicaciones y metodologías.
8. Pasos en un proceso convencional de determinación estructural. Programas empleados (muestras monocristalinas).
9. Seminarios de presentación y discusión de artículos en el área de la Química Molecular y Catálisis.

## 4. Actividades académicas

El proceso de aprendizaje utilizará presentaciones en clase, previamente disponibles por lo alumnos, sobre las que los profesores disertarán planteando cuestiones diversas y estimulando su participación en la descripción y comprensión de los conceptos. En algunas clases se adelantarán textos cortos de lectura que introduzcan los conceptos a explicar en la clase y que sirvan de motivación previa al alumno.

Aparte de las clases interactivas con los alumnos, al comienzo del curso se incluirá la lectura de textos de adaptación curricular de aquellos alumnos que lo requieran, y el análisis, estudio y comentario posterior de textos complementarios a los conceptos desarrollados en clase.

Adicionalmente se plantearán ejercicios prácticos sobre simetría espacial, evaluación de ausencias sistemáticas, o red recíproca, a trabajar en grupo. El profesor realizará la resolución paso a paso de una estructura molecular en clase, a partir de las indicaciones de los alumnos.

Clases Magistrales: 1 ECTS

Resolución de problemas y seminarios y prácticas con ordenador: 1 ECTS

## 5. Sistema de evaluación

La evaluación del estudiante, en relación a los resultados de aprendizaje previstos, se realizará de **modo continuo** sobre la base de las siguientes actividades:

1.- Controles de resolución de problemas, cuestiones prácticas, ejercicios y otras actividades semejantes realizadas a lo largo de la asignatura. Al final de cada tema, se distribuirá un cuestionario con un número reducido de cuestiones básicas para que los alumnos lo elaboren como trabajo personal fuera de clase; estos documentos serán pieza clave en la evaluación (40 %).

2.- Presentación de los resultados estructurales publicados en un trabajo científico reciente de interés del alumno. El alumno deberá hacer muestra del conocimiento, uso correcto y preciso de los conceptos abordados en el desarrollo del curso (20 %).

3.- Prueba escrita u oral (a decidir por los alumnos), a realizar al final de la impartición de la asignatura, consistente en la resolución de problemas y cuestiones sobre los contenidos impartidos (40 %).

Aquellos alumnos que no superen la asignatura, o desearan mejorar su calificación, podrán optar a una prueba global que consistirá en el comentario de la parte estructural de una publicación actual relacionada con la temática del máster (40 %) y la respuesta a una serie de cuestiones de carácter teórico sobre los conceptos impartidos a lo largo del curso (60 %).

El número de convocatorias oficiales de examen a las que la matrícula da derecho (2 por matrícula), así como el consumo de dichas convocatorias, se ajustará a la *Normativa de Permanencia en Estudios de Máster* y al *Reglamento de Normas de Evaluación del Aprendizaje* (<https://ciencias.unizar.es/normativas-asuntos-academicos>).