

Plan 558 MÁSTER QUÍMICA SINTÉTICA E INDUSTRIAL

Asignatura 52246 DIFRACCIÓN DE RAYOS X

Grupo 1

Tipo de asignatura (básica, obligatoria u optativa)

OPTATIVA

Créditos ECTS

3

Competencias que contribuye a desarrollar

Competencias generales

- G1.- Conocimiento del método científico.
- G2.- Competencia para aplicar los conocimientos adquiridos.
- G3.- Capacidad crítica, de análisis y síntesis, y capacidad de interpretación.
- G4.- Competencias metodológicas.
- G5.- Capacidad para valorar la originalidad y creatividad.
- G6.- Capacidades de comunicación.
- G7.- Capacidad de trabajo en equipo.
- G8.- Capacidad para el uso de las nuevas tecnologías.
- G9.- Desarrollar el interés por la formación permanente.
- G10.- Capacidad de aprendizaje autónomo.

Competencias Específicas

- E1.- Adquisición de destrezas técnicas generales en el ámbito de una o varias disciplinas químicas.
- E3.- Capacidad para iniciarse en la investigación en Química.
- E4.- Capacidad y destrezas para la gestión de las fuentes de la investigación en Química.

Objetivos/Resultados de aprendizaje

El objetivo de esta asignatura es capacitar al estudiante para reconocer el potencial de las diferentes técnicas de difracción en el marco de su investigación particular y poder ser capaz de seguir, e incluso realizar personalmente, el proceso de medida y tratamiento posterior de los datos hasta la obtención de la información estructural perseguida, así como a interpretar críticamente los datos que se pueden obtener de bases de datos o de publicaciones científicas

Contenidos

Programa de la asignatura.

Tema 1. Introducción a la cristalografía

Ideas básicas sobre materia cristalina. Periodicidad y simetría en los materiales. Celda elemental y simetría. Red cristalina. Redes de Bravais. Grupos Puntuales. Grupos Espaciales.

Tema 2. Determinación de estructuras cristalinas por difracción de rayos X

Difracción de rayos x en monocristal. El aparato y la toma de datos. Resolución y refinamiento de estructuras. Interpretación de los resultados. Criterios de análisis de los mismos.

Tema 3. Software complementario: Mercury y búsqueda de rayos X con CSD.

Tema 4. Software de resolución de rayos X: olex2.

Posteriormente cada alumno resolverá totalmente una estructura diferente a partir de datos del difractor. Analizará y discutirá los resultados obtenidos.

Principios Metodológicos/Métodos Docentes

Métodos Docentes presenciales

- Clases teóricas.
- Clases de problemas y seminarios.
- Tutorías.

Métodos Docentes no presenciales

- Estudio y resolución de casos reales.
- Realización de trabajos.

Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial

- Aula de video conferencia.
- Aula de informática.
- Software específico de cristalografía.
- Plataforma Moodle (Campus Virtual UVa)

Criterios y sistemas de evaluación

Evaluación continua.

Evaluación teórico-práctica. Prácticas obligatorias. Informe final.

La evaluación del alumnado se llevará a cabo teniendo en cuenta, entre otros, dos aspectos: a) actitud, participación, implicación durante el desarrollo de la disciplina, y b) calidad del informe final presentado y su defensa ante sus compañeros y profesores, valorándose el grado de adquisición de competencias específicas de la disciplina

Recursos de aprendizaje y apoyo tutorial

- Aula de video conferencia.
- Aula de informática.
- Software específico de cristalografía.
- Plataforma Moodle (Campus Virtual UVa)

Calendario y horario

EL QUE SE PROPONGA DENTRO DE LA ORDENACIÓN Y PLANIFICACIÓN DEL MÁSTER.

Tabla de Dedicación del Estudiante a la Asignatura/Plan de Trabajo

ACTIVIDADES PRESENCIALES

HORAS

ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

HORAS

Clases teóricas

15

Estudio individual

15

Clases de seminario (software)

10

Trabajo autónomo individual

30

Resolución estructura tutelada

3

Informe y presentación de resultados

2

Total presencial

30

Total no presencial

45

Responsable de la docencia (recomendable que se incluya información de contacto y breve CV en el que aparezcan sus líneas de investigación y alguna publicación relevante)

Profesores:

Manuel Bardají, bardaji@qi.uva.es

Jesús Ángel Miguel, jamiguel@qi.uva.es

Departamento de Química Inorgánica y Química Física.

1. Breve CV de Manuel Bardají :

Premio extraordinario en la Licenciatura en Ciencias Químicas (universidad de Zaragoza 1985-1990), Tesis Doctoral con premio extraordinario (Univ. de Zaragoza, 1994), estancia postdoctoral de 2 años en el CNRS. Experiencia en trabajo en grupos de gran nivel como el de Profs. Antonio y Mariano Laguna ICMA-univ. Zaragoza (centro mixto CSIC) donde estuve 4 años, del prof. Neil G. Connelly en la prestigiosa School of Chemistry de la univ de Bristol, Reino Unido (6 meses), Bruno Chaudret en LCC-CNRS-Francia (2 años postdoc y 3 meses en colaboración a lo largo de 3 años), Antonio Laguna ICMA-univ. Zaragoza (centro mixto CSIC) durante otros 6 años y finalmente como Profesor Titular con el Prof. Pablo Espinet en univ. Valladolid durante los últimos 12 años.

56 publicaciones indexadas, un capítulo de libro (Wiley), dos publicaciones docentes, 32 participaciones en congresos científicos y 4 en congresos docentes.

Destacar las 65 citas de un trabajo sobre síntesis de compuestos de oro(I) de mi Tesis Doctoral (Dalton 1994), mi trabajo pionero en metalodendrimeros (176 citas, JACS de 1995), mis trabajos pioneros en luminiscencia asociada a oro (más de 220 citas), cristales líquidos discóticos (60 citas de JACS 2005), y finalmente mis trabajos en materiales funcionales asociando esta luminiscencia en complejos de oro(I) a otras propiedades como las de cristal líquido (26 citas, Inorg. Chem. 2008; metalomesógeno luminiscente en sólido, en la mesofase y como líquido), mesogenia y propiedades de transporte (20 citas de JOM 2005; transporte de alcalinos mediante éteres corona unidos a un compuesto cristal líquido) o preparando compuestos de oro fotosensibles (19 citas de Inorg. Chem. 2009, son cristales líquidos calamíticos que se vuelven líquido isotrópico reversiblemente al ser irradiados con un láser; 11 citas de Dalton 2011 donde hay compuestos de oro y plata que cambian al ser irradiados). Últimamente, he estado trabajando en derivados de oro y plata luminiscentes con biisoquinolina (ICAs 2012) y con estructuras supramoleculares generadas con enlaces de hidrógeno: fotoluminiscentes de plata (ICA 2014 en prensa) y cristales líquidos discóticos de oro y cromo (Inorg. Chem. 2014 en prensa).

Colaboro como "referee" desde 2006 con la ACS, la RSC (Dalton Transactions, Chemical Communications, New Journal of Chemistry, Metallomics, Physical Chemistry Chemical Physics, The Analyst; por ej. 19 veces según el certificado del 2013) y Elsevier (Inorganic Chemistry Communications).

Participo o he participado en proyectos Consolider, Nacionales y Regionales (Grupo de Excelencia), proyectos en los que se busca aunar la investigación de bastantes investigadores dentro de proyectos comunes, pero con un alto grado de independencia de los investigadores individuales. He impartido charlas sobre mis temas de trabajo preferidos: la química del oro, la luminiscencia y las nanopartículas metálicas.

Desde mis inicios he colaborado en la docencia más relacionada con la investigación (Programa de Doctorado y de Máster): he dirigido 4 Tesis de Licenciatura, una Tesis Doctoral y estoy dirigiendo otra. He participado en la puesta en marcha de 3 Másteres oficiales, donde sigo colaborando en su docencia y la dirección de Trabajos Fin de Máster (4 de investigación y 6 docentes), así como en Trabajos Fin de Grado (1 de investigación).

Idioma en que se imparte

ESPAÑOL