



## Proyecto docente de la asignatura

<b>Asignatura</b>	<b>DIFRACCION DE RAYOS X</b>		
<b>Materia</b>			
<b>Módulo</b>			
<b>Titulación</b>	<b>Máster interuniversitario en Química Sintética e Industrial</b>		
<b>Plan</b>	558	<b>Código</b>	52246
<b>Periodo de impartición</b>	2º cuatrimestre	<b>Tipo/Carácter</b>	optativa
<b>Nivel/Ciclo</b>		<b>Curso</b>	
<b>Créditos ECTS</b>	3		
<b>Lengua en que se imparte</b>	español		
<b>Profesor/es responsable/s</b>	Manuel Bardají Luna Jesús Ángel Miguel		
<b>Departamento(s)</b>	Química Física y Química Inorgánica		
<b>Datos de contacto (E-mail, teléfono...)</b>	<a href="mailto:bardaji@qi.uva.es">bardaji@qi.uva.es</a> <a href="mailto:jamiguel@qi.uva.es">jamiguel@qi.uva.es</a>		



## **1. Situación / Sentido de la Asignatura**

---

Primer curso del Master. Segundo cuatrimestre

### **1.1 Contextualización**

---

Materia teórico-práctica.

Conocer la técnica de difracción de rayos X, principalmente en monocristal y su aplicación al análisis estructural en Química Sintética.

### **1.2 Relación con otras materias**

---

Complementaria con otras asignaturas de técnicas de caracterización estructural o de cálculos teóricos.

### **1.3 Prerrequisitos**

---

Ninguno





## 2. Competencias

### 2.1 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.

### 2.2 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.
- Principios Metodológicos/Métodos Docentes





### 3. Objetivos

Ideas básicas sobre materia cristalina y simetría en los materiales.

Conocer el equipo de difracción de rayos X, su uso y los datos que nos proporciona.

Resolver estructuras de rayos X de monocristal con el software adecuado. Aprender a manejar dicho software (olex2).

Analizar e interpretar los resultados obtenidos.

### 4. Contenidos

#### 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 difractómetro. Analizará y discutirá los resultados obtenidos.

### 5. Métodos docentes y principios metodológicos

- Clases teóricas.
- Clases de seminarios.
- Tutorías.
- Tutorías en grupo en clase de informática.
- trabajo individual con software específico.

**6. Tabla de dedicación del estudiante a la asignatura**

ACTIVIDADES PRESENCIALES	HORA S	ACTIVIDADES NO PRESENCIALES	HORA S
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	<b>30</b>	Total no presencial	<b>45</b>

**7. Sistema y características de la evaluación**

INSTRUMENTO/PROCEDIMIENTO	PESO EN LA NOTA FINAL	OBSERVACIONES
Evaluación continua.	20 %	actitud, participación, implicación durante el desarrollo de la disciplina
Trabajo final (resolución de estructura cristalina)	80 %	calidad del informe final presentado

**CRITERIOS DE CALIFICACIÓN**

- **Convocatoria ordinaria:**
  - ...
- **Convocatoria extraordinaria:**
  - ...

**8. Consideraciones finales**