

**Proyecto/Guía docente de la asignatura**

Se debe indicar de forma fiel cómo va a ser desarrollada la docencia. Esta guía debe ser elaborada teniendo en cuenta a todos los profesores de la asignatura. Conocidos los espacios y profesorado disponible, se debe buscar la máxima presencialidad posible del estudiante siempre respetando las capacidades de los espacios asignados por el centro y justificando cualquier adaptación que se realice respecto a la memoria de verificación. Si la docencia de alguna asignatura fuese en parte online, deben respetarse los horarios tanto de clase como de tutorías). La planificación académica podrá sufrir modificaciones de acuerdo con la actualización de las condiciones sanitarias.

<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>	Daniel Miguel San José Jesús Ángel Miguel Raúl García Rodríguez		
<b>Datos de contacto (E-mail, teléfono...)</b>	daniel.miguel@uva.es <a href="mailto:jamiguel@uva.es">jamiguel@uva.es</a> raul.garcia.rodriguez@uva.es		
<b>Departamento</b>	Química Física y Química Inorgánica		



## **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 y/o bloques temáticos

##### 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.

**Prácticas individuales.-** Cada alumno resolverá totalmente una estructura diferente a partir de datos del difractor. 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	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



## 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