

Métodos de difracción

**MÁSTER UNIVERSITARIO EN CRISTALOGRAFÍA Y
CRISTALIZACIÓN**

UNIVERSIDAD INTERNACIONAL MENÉNDEZ PELAYO

Este documento puede utilizarse como documentación de referencia de esta asignatura para la solicitud de reconocimiento de créditos en otros estudios. Para su plena validez debe estar sellado por la Secretaría de Estudiantes UIMP.



DATOS GENERALES

Breve descripción

El curso enseña los fundamentos de la difracción y de imagen, centrándose en la naturaleza común de ambos fenómenos, la universalidad de los procesos de difracción de fotones, neutrones y electrones, y el uso práctico de estos métodos en cristalografía.

Título asignatura

Métodos de difracción

Código asignatura

101160

Curso académico

2016-17

Planes donde se imparte

[MÁSTER UNIVERSITARIO EN CRISTALOGRAFÍA Y CRISTALIZACIÓN](#)

Créditos ECTS

7

Carácter de la asignatura

OBLIGATORIA

Duración

Anual

Idioma

Inglés

CONTENIDOS

Contenidos

La asignatura se estructura en tres bloques temáticos:

- a) Radiaciones en Cristalografía: Presenta la naturaleza y propiedades de los rayos X, los neutrones y los electrones, su utilización como sondas experimentales en función de sus mecanismos de interacción con la materia, los procesos usados en la práctica para su generación y detección y las consideraciones de seguridad necesarias para su utilización como herramienta de experimentación o ensayo.
- b) Dispersión y difracción: En este bloque se profundiza en el fenómeno de la dispersión y en particular en su comportamiento cooperativo para dar lugar a difracción en el caso de dispersión por redes periódicas. Tras explicar los mecanismos de dispersión Thomson y Compton y sus implicaciones en cristalografía, se presenta el concepto central de interferencia de ondas y los casos de interferencia de ondas dispersadas por átomos y moléculas y, finalmente, por una distribución periódica de dispersores, presentando las herramientas conceptuales usadas para trabajar en el espacio recíproco, que facilitan el tratamiento matemático de la difracción. A continuación se presenta la teoría cinemática de difracción de un cristal mosaico ideal, la difracción por materiales parcialmente desordenados. Se aborda finalmente los aspectos cuantitativos de la difracción (intensidad difractada) y la difracción a longitudes de onda próximas a bordes de absorción (dispersión anómala). Como colofón a este bloque se introduce el problema central de la cristalografía estructural: la imposibilidad a priori de calcular la distribución en el espacio real de la distribución de elementos dispersores (átomos) a partir de los datos de difracción en espacio recíproco debido a la pérdida de parte de la información (las fases) durante la adquisición de datos de difracción. Los métodos para solucionar este problema, denominado 'Problema de las fases', constituyen el punto de arranque de la asignatura de 'Resolución y Refino de Estructuras'; del Máster.
- c) El experimento de difracción: En este bloque se introducen los diferentes métodos experimentales para la implementación de experimentos de difracción (polvo, monocristal, oscilación, difracción de alta resolución...). La geometría y otros factores experimentales relativos a cada método serán presentados para proporcionar una comprensión adecuada de la utilidad y limitaciones de cada método y su aplicabilidad a cada problema concreto. A continuación se presentan las características de los tres elementos fundamentales de todo experimento de difracción (generador, goniometro, detector) y la utilización de cada uno de ellos en combinación los restantes para la definición de experimentos de difracción óptimos para cada problema concreto. Se introduce la difracción de neutrones y de electrones como complementos a la de rayos X o para la solución de problemas específicos y se presentan los fundamentos y las utilidades de los experimentos en instalaciones de radiación sincrotrón. La materia termina con una serie de clases y de sesiones prácticas sobre la optimización de la recogida de datos, el análisis y la reducción de datos de difracción para su uso en la determinación estructural.

COMPETENCIAS

Generales

- CG1. Capacidad de análisis y síntesis
- CG2. Resolución de problemas
- CG3. Trabajo en un equipo de carácter interdisciplinario
- CG4. Trabajo en un contexto internacional
- CG5. Aprendizaje y trabajo autónomos
- CG6. Capacidad de aplicar los conocimientos teóricos en la práctica
- CG7. Capacidad de elaboración y transmisión de ideas, proyectos, informes, soluciones y problemas
- CG8. Capacidad de organización y planificación
- CG9. Capacidad de entender el lenguaje y propuestas de otros especialistas

Transversales

No existen competencias de este tipo para este programa.

Específicas

- CE1. Diseñar un experimento óptimo de difracción en función del problema y el compuesto, definiendo el instrumental y el método más adecuados así como la estrategia de adquisición de datos que maximice la utilidad de los mismos.
- CE2. Mantener bajo control la adquisición y proceso de los datos, conociendo en cada momento los procesos físicos y las características experimentales que condicionan la validez y precisión de los datos de difracción.
- CE3. Utilizar técnicas de imagen (espacio directo) como complemento al experimento de difracción (espacio recíproco) o como instrumento aislado para la solución de problemas.
- CE4. Desarrollar una capacidad de valoración crítica de los experimentos de difracción y de los datos obtenidos que le permita ser independiente de los métodos de "caja negra informática"; habituales en los entornos donde los métodos de análisis de datos son muy complejos.
- CE5. Desarrollar las herramientas intelectuales y técnicas para la implementación de nuevos experimentos y técnicas experimentales heterodoxos y novedosos en la frontera de los actualmente disponibles que le permita explorar de nuevos problemas.

PLAN DE APRENDIZAJE

Actividades formativas

- Clases presenciales activas
- Talleres de resolución de problemas.
- Talleres prácticos y demostraciones experimentales en el aula.
- Prácticas de computación y bases de datos
- Tutoría individual o grupal
- Seminarios.
- Visitas a empresa o centro de investigación
- Evaluación
- Trabajo en grupo

Resultados de aprendizaje

Esta asignatura pretende ofrecer a los alumnos un conocimiento fundamental, tanto desde el punto de vista teórico como desde el aplicado, de:

- Conocer la naturaleza y propiedades de las radiaciones utilizadas en cristalografía (rayos X, neutrones y electrones), las propiedades que las hacen adecuadas como sondas experimentales; y su uso adecuado y seguro durante la experimentación.
- El fenómeno de la difracción, su origen y peculiaridades dependiendo el tipo de radiación y de las propiedades de la misma, la relación entre periodicidad cristalina y difracción.
- Conocer los métodos utilizados en cristalografía para la obtención de datos de difracción, la selección del método más adecuado a cada problema y la optimización del equipamiento necesario para implementar cada técnica experimental (generadores, goniómetros, detectores).
- Los métodos de espacio directo (imagen) usados con materiales cristalinos tanto como soporte de los experimentos de difracción como aisladamente para estudios en cristalografía y cristalización.
- Técnicas experimentales heterodoxos y novedosos en la frontera de los actualmente disponibles que le permita explorar de nuevos problemas.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

Descripción del sistema de evaluación

Evaluación de los ejercicios de las clases prácticas y examen final.

Calendario de exámenes

Asignatura no ofertada en el curso académico 2015-2016

PROFESORADO

Profesor responsable

Otálora Muñoz, Fermín

*Investigador Científico
Laboratorio de Estudios Cristalográficos (LEC)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)*

Profesorado

Masciocchi , Norberto

*Catedrático de Química Inorgánica
Universita degli Studi dell'Insubria*

Rubio Zuazo, Juan

*Científico Titular
Laboratorio Europeo de Radiación Sincrotrón (ESRF)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)*

Powell , Harry

*Crystallographer
Laboratory of Molecular Biology, United Kingdom*

Giacovazzo , Carmelo

*Full Professor
University of Bari, Italy*

Cervera Gontard, Lionel

Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla (ICMSE-CSIC-US)

Justo Erbez, Ángel

*Investigador Científico
Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla*

Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

Choquesillo Lazarte, Duane

Investigador Postdoctoral

Laboratorio de Estudios Cristalográficos (LEC)

Centro Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

HORARIO

Horario

De 9:00 a 17:30 de lunes a viernes