

# Densidades electrónicas

**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 **Módulo III - Cursos de especialización**, del que forma parte esta asignatura, incluye una selección de asignaturas en temas especializados que permitirán al alumno diseñar, con la ayuda de su tutor, el conjunto de conocimientos y habilidades que mejor se adapten a sus expectativas investigadoras o laborales. El alumno deberá cursar un total de 6 ECTS en este módulo.

Varias de las asignaturas ofertadas en este módulo se imparten en forma de cursos intensivos internacionales de una semana de duración abiertos a estudiantes no inscritos en el Máster, con el objetivo de diversificar y enriquecer el entorno de formación de los estudiantes con un mayor número y variedad de profesores y compañeros (futuros colegas y colaboradores).

Por la naturaleza de la enseñanza en este módulo, las asignaturas, en especial las que se corresponden con cursos internacionales, se impartirán en diferentes ubicaciones, incluyendo laboratorios extranjeros cuando la especificidad del tema así lo imponga (por ejemplo, la asignatura de "Cristalografía en grandes instalaciones"). La oferta de asignaturas, así como el número máximo de estudiantes en cada asignatura y el mínimo necesario (en su caso), se fijarán y comunicarán anualmente. Algunas de las asignaturas correspondientes a cursos internacionales tendrán periodicidad bianual.

La asignatura de **Densidades electrónicas** pretende abordar la conexión entre los resultados que puede proporcionar el experimento de difracción de rayos X y las propiedades químicas de las sustancias, como pueden ser las interacciones que permiten su organización en sistemas complejos, su función biológica, mecánica, óptica o catalítica, o su capacidad de producir reacciones químicas:

- Se explorarán los límites de la difracción de rayos X de monocristal para el estudio de las propiedades moleculares, con especial énfasis en el estudio de los estados excitados.
- Se analizarán los métodos complementarios para el estudio de estas propiedades que proporcionan información externa al experimento, que resultará vital en muchos casos para entender los resultados del experimento de difracción.
- Se abordará, desde de un punto de vista eminentemente práctico, las condiciones necesarias para obtener las medidas de difracción con la precisión requerida para obtener una descripción precisa de la distribución electrónica en nuestros cristales. Se prestará especial atención a los experimentos de difracción en la región de los 10-20 K y a las técnicas e instrumental de trabajo con Helio líquido.

**Título asignatura**

Densidades electrónicas

**Código asignatura**

101177

**Curso académico**

2016-17

**Planes donde se imparte**

[MÁSTER UNIVERSITARIO EN CRISTALOGRAFÍA Y CRISTALIZACIÓN](#)

**Créditos ECTS**

3

**Carácter de la asignatura**

OPTATIVA

**Duración**

Anual

**Idioma**

Inglés

# CONTENIDOS

## Contenidos

Los contenidos de la asignatura se estructuran en los siguientes temas:

- Difusión de rayos X y neutrones por los átomos: Teoría de la difusión de rayos X. Difusión resonante de rayos X. Difusión de neutrones.
- Efecto de la vibración térmica en la intensidades difractadas: Modos de vibración normales en un cristal. Efecto de la vibración térmica en las intensidades difractadas.
- Relación entre los factores de agitación térmica y la dinámica de red.
- El enlace químico y el formalismo de difusión: Limitaciones del modelo del átomo independiente. Modelos de difusión mejorados.
- Métodos de ajuste por mínimos cuadrados y su uso en el análisis de densidades de carga: Ecuaciones del método mínimos cuadrados. Parámetros de mínimos cuadrados en el análisis de densidades de carga. Constricciones físicas de la densidad electrónica. Afinamiento combinado de datos de Rayos X y neutrones.
- Métodos de Fourier y máxima entropía: Densidades de deformación. Mejora de la densidad electrónica por máxima entropía.
- Partición del espacio y análisis topológico de la densidad de carga: Partición del espacio basada en la topología de la densidad electrónica total. Enlace químico y topología de la distribución de la densidad electrónica total.
- Momentos electrostáticos de una distribución de carga: Momentos de una distribución de Cargas. Momentos electrostáticos a partir de los datos experimentales de difracción.
- El potencial electrostático y la difracción de rayos X: Evaluación del potencial electrostático y sus derivadas en el espacio recíproco. Evaluación de las funciones electrostáticas en el espacio real.
- Densidad de carga en la práctica. Herramientas y aplicaciones: Métodos computacionales para el estudio de densidades de carga. Densidad electrónica en cristales iónicos.
- Densidad de carga en cristales moleculares.

## CONOCIMIENTOS PREVIOS REQUERIDOS

Los estudiantes que sigan esta asignatura deben poseer conocimientos de cristalografía básica, matemáticas y computación, así como conocimientos elementales de mecánica cuántica.

Serán necesarios asimismo conocimientos elementales de química y destreza en la utilización de ordenadores personales en entornos Windows o Linux.

## 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

CT1.- Comunicación oral y escrita

CT2.- Conocimiento de lenguas extranjeras

CT3.- Capacidad de gestión de la información

CT4.- Habilidades en las relaciones interpersonales

CT5.- Trabajo en equipo

CT6.- Razonamiento crítico

CT7.- Creatividad

CT8.- Uso de Internet como medio de comunicación y fuente de información

### Específicas

CE4.- Entender y valorar artículos científico-técnicos de revistas especializadas en cristalografía y cristalización

CE19.-Ser capaz de reconocer sistemas ligados por interacciones débiles, de sistematizar el tipo de interacción y describir sus parámetros estructurales y termodinámicos relevantes

CE25.- Comprender los métodos que permiten analizar densidades electrónicas a partir de datos de difracción

CE26.- Saber interpretar los resultados del análisis de la densidad de carga

# PLAN DE APRENDIZAJE

## Actividades formativas

AF1.- Clases presenciales activas: Combinación de teoría, problemas cortos, preguntas y discusión con los alumnos.

AF4.- Seminarios.

AF5.- Prácticas de computación y bases de datos.

AF6.- Tutoría individual o grupal.

AF7.- Evaluación.

AF8.- Clases prácticas en laboratorio.

AF9.- Planificación, realización y análisis de experimentos (tutelada).

AF10.- Trabajo autónomo.

AF11.- Visitas a empresa o centro de investigación.

AF12.- Trabajo en grupo.

## Resultados de aprendizaje

Tras cursar esta asignatura, el alumno debe ser capaz de:

- Entender los fundamentos del análisis de densidades electrónicas a partir de datos de difracción de Rayos X.
- Ser capaces de llevar a cabo experimentos de difracción para la toma de datos apropiados para estudios de densidades de carga.
- Adquirir la capacidad de hacer estudios de densidades de carga e interpretar las magnitudes derivadas del estudio.
- Conocer los fundamentos del análisis topológico de la densidad electrónica total.
- Adquirir la competencia para interpretar los resultados del análisis topológico de la densidad electrónica total.
- Lograr la capacidad de manejar, entender y analizar los resultados de los programas de análisis de densidades de carga.



# SISTEMA DE EVALUACIÓN

## Descripción del sistema de evaluación

### Sistema de evaluación (ponderación mínima y máxima %)

- Prueba escrita (0%-80%)
- Realización de prácticas y/o cuaderno de prácticas (0%-70%)
- Realización y presentación de trabajos e informes (0%-50%)
- Participación en seminarios (0%-30%)
- Participación en clase (0%-30%)

## Calendario de exámenes

Asignatura no ofertada en el curso académico 2015-2016

## PROFESORADO

### Profesor responsable

**Lahoz Díaz, Fernando José**

*Profesor de Investigación*

*Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH)*

*Centro Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)*

### Profesorado

Profesor Responsable de la asignatura

## BIBLIOGRAFÍA Y ENLACES RELACIONADOS

### Bibliografía

X-Ray charge densities and chemical bonding, Philip Coppens. Oxford University Press, Inc., New York, 1997.

Atoms in Molecules, Richard F. W. Bader. Oxford University Press, Inc., New York, 1990.

New information from modern charge density methods, F. K. Larsen, Acta Cryst. A60, part 5. 2004.