

Título del Curso: **Análisis estructural por métodos difractométricos**

Departamento responsable: **Química Inorgánica**

Número de créditos: **6**

Número máximo de estudiantes a admitir: **30**

Criterios de selección: **1. Adecuación curricular a los contenidos del curso.
2. Expediente académico**

Número mínimo de estudiantes para su impartición: **3**

Requisitos de los estudiantes a admitir: **Licenciatura en Ciencias
(Químicas, Físicas, Biológicas, Geológicas o Bioquímica)**

Sistema de evaluación: **Continuo, mediante interacción directa con los alumnos.**

Centro de impartición: **Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza**

Temario: **0.- El análisis estructural por difracción: potencialidades y aplicaciones. 1.- Rayos X y otras radiaciones alternativas (producción, características especiales, infraestructura, nuevas fuentes de radiación, etc.) 2.- El cristal – Conceptos fundamentales en espacio real y recíproco - Aspectos macroscópicos. 3.- El proceso de la difracción – Aproximación cualitativa (Ley de Bragg) y cuantitativa (Factor de estructura) 4.- Solución y refinamiento de estructuras cristalinas – El problema de la fase – Aspectos prácticos del refinamiento 5.- Análisis estructural – Relación estructura/actividad – Modelización estructural – Uso químico de las bases de datos estructurales 6.- Otros métodos alternativos de determinación estructural (método de Rietveld, espectroscopias estructurales, etc.)**

Profesores responsables:

Nombre(s) y dos apellidos: **Dr. Fernando J. LAHOZ DIAZ**

Número de créditos: **2.8**

DNI (con letra): **17.201.503-X**

Área de conocimiento: **Química Inorgánica**

Línea de Investigación: **Análisis estructural de compuestos de coordinación – Establecimiento de relaciones estructura/actividad.**

Nombre(s) y dos apellidos: **Dr. José A. LOPEZ CALVO**

Número de créditos: **2.8**

DNI (con letra): **17.214.608-M**

Área de conocimiento: **Química Inorgánica**

Líneas de Investigación: **Análisis estructural de compuestos de coordinación – Establecimiento de relaciones estructura/actividad.**

Profesores invitados

Nombre: **Prof. Frank H. Allen**

Días: **4 días (Mayo 2004)**

Ciudad/País: **Cambridge (Reino Unido)**

Créditos: **0.4**

Breve descripción de los objetivos específicos del curso: **Se pretende dotar al alumno de los conceptos básicos para poder abordar, de manera autónoma, el tratamiento de datos de los compuestos preparados en su tesis doctoral, así como establecer relaciones fundadas entre estructura y actividad química. La parte práctica utilizará datos de los propios alumnos e incluirá experiencias de todos los distintos pasos de un análisis estructural, desde el montaje de la muestra, hasta la presentación de resultados.**

Metodología docente del curso: **La parte teórica del curso se impartirá a partir de una serie de clases magistrales con abundante documentación gráfica y numerosos problemas prácticos puntuales, utilizados como elementos dinamizadores. La parte práctica utilizará instrumental del Instituto de Ciencias de Materiales de Aragón y programas de dominio público para el tratamiento de datos.**

Calendario de impartición de clases: **2º Cuatrimestre (martes y jueves de 13 a 14 h.)**

Bibliografía comentada y clasificada:

* **William Clegg**, *Crystal Structure Determination*, Ed. Oxford University Press, Oxford, 1998. (Oxford Chemistry Primers)

Excelente texto de introducción a esta metodología, esquemático y con poca componente matemática. Contiene comentarios sobre un buen número de ejemplos reales.

***Cristopher Hammond**, *The Basics of Crystallography and Diffraction*, Oxford University Press, Oxford, 1997. (IUCr Texts on Crystallography 3) *Contiene los conceptos fundamentales relativos al proceso de difracción y su aplicación en Química. Buen tratamiento de los aspectos de simetría cristalina.*

***George H. Stout and Lyle H. Jensen**, *X-Ray Structure Determination, A practical Guide*, Ed. John Wiley & Sons, New York, 1989. (2ª edición)
Ha sido durante muchos años el libro de referencia en los aspectos prácticos en esta área, si bien en algunos apartados no incorpora las últimas novedades.

***C. Giacovazzo et al**, *Fundamentals of Crystallography*, Ed. Oxford Science Publications (IUCr), Oxford, 1992 (1ª edición). 2002 (2ª edición).
Representa el 'libro de texto' en esta área. Se trata de un libro actualizado, con un riguroso tratamiento matemático de todos los aspectos y suficientemente actualizado. Sin lugar a dudas el mejor libro de referencia.

***Jenny P. Glusker, Mitchell Lewis and Miriam Rossi**, *Crystal Structure Analysis for Chemists and Biologists*, Ed. VCH, New York, 1994.
Libro de referencia con abundantes ejemplos en el campo de las macromoléculas; dirigido especialmente para científicos interesados en la estructura de proteínas y compuestos relacionados.

* **Jack D. Dunitz**, *X-Ray analysis and the structure of organic molecules*, Ed. Cornell University Press, London, 1979.
Un clásico en la determinación de estructuras moleculares de compuestos orgánicos. Presenta una buena descripción de un número reducido de casos en los que la estructura molecular se relaciona fácilmente con la reactividad química.

* **B.K. Vainshtein**, *Modern Crystallography, I-Symmetry of Crystals, methods of Structural Crystallography*, Ed. Springer, Berlin, 1994.
Excelente aproximación física al proceso de la difracción y de la simetría en cristales reales. Contiene una amplia información sobre el tratamiento matemático de la difracción.

Desarrollo del curso: **La parte teórica del curso se realizará entre Enero y Abril. La parte práctica del curso, conjuntamente con las lecciones del profesor invitado, ocupará los meses de Mayo y Junio. Existe la posibilidad de agrupar toda la parte práctica en una única semana (previo acuerdo de alumnos y profesorado)**

Técnicas de comunicación empleadas fuera de clase: **Consulta dirigida de otros WEBS públicos de otras entidades o investigadores.**

Tipo de Tutoría docente: **Presencial (telefónica para aspectos prácticos puntuales) y vía correo electrónico.**

Lengua de impartición del curso: **Español e Inglés (10% aprox.)**