Difracción bajo condiciones extremas

MÁSTER UNIVERSITARIO EN CRISTALOGRAFÍA Y CRISTALIZACIÓN

UNIVERSIDAD INTERNACIONAL MENÉNDEZ PELAYO

Másteres Universitarios

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.

El objetivo fundamental de la asignatura de **Difracción bajo condiciones extremas** es ofrecer al alumno una visión profunda y actual del tema de los estudios de materiales bajo condiciones extremas de presión y temperatura, con el objetivo de que al final del curso dispongan de las herramientas necesarias para evaluar las posibilidades de sus compuestos y los posibles estudios a realizar, así como el donde y el cómo.

Los objetivos concretos son los siguientes:

- Introducir los conceptos básicos de química y física del estado sólido en condiciones extremas de presión y temperatura o la combinación de ambas.
- Conocimiento de las diferentes fuentes (rayos X, sincrotrón y neutrones).
- Diseño del experimento, tomad de datos y análisis de los resultados.
- Clasificación de transiciones de fase.
- Relación estructura-propiedad bajo condiciones extrema

Título asignatura

Difracción bajo condiciones extremas

Código asignatura

101176

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:

- **Fundamentos**

Cristaloquímica de altas presiones. Ecuación de estado y propiedades termofísicas de sólidos bajo presión. La celda anvill de diamante: instrumento de presión estática. Diferentes fuentes (rayos X, sincrotrón y neutrones) en condiciones extremas. Introducción a la cristalografía computacional en condiciones extremas de presión y temperatura.

- **Difracción**

Cristalografía de altas presiones desde medidas espectroscópicas (ópticas y de rayos X). Difracción de neutrones en condiciones extremas. Experimentos de Sincrotrón en condiciones extremas. Difracción bajo altas presiones y determinación estructural. Monocristales de pequeñas moléculas. Muestras policristalinas. Cristalografía macromolecular bajo alta presión hidrostática.

- **Temas avanzado**s

Materiales "blandos" y biomateriales en condiciones extremas. Vidrios, materiales amorfos y líquidos en condiciones extremas. Investigaciones de sistemas de "enlace de hidrógeno" bajo altas presiones. Cristalografía macromolecular bajo alta presión hidrostática. Presión en empaquetamientos supramoleculares.

CONOCIMIENTOS PREVIOS REQUERIDOS

Cualquier alumno de Ciencias podría seguir esta asignatura, puesto que pueden suponérsele los conocimientos necesarios siguientes:

- Conocimientos básicos de cristalografía (los alumnos del Máster los adquieren en el Módulo I).
- Conocimientos básicos de paquetes informáticos sobre resolución estructural (los alumnos del Máster los adquieren en el Módulo I).
- Conocimientos básicos de utilización de bases de datos cristalográficas.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE Y DE FORMACIÓN

Generales

CG1.- Capacidad de análisis y síntesis

CG2.- Resolución de problemas

CG3.- Trabajo en un equipo de caracter 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

CE16.- Ser capaz de identificar los experimentos que requieren el uso de grandes instalaciones

CE23.- Ser capaz de combinar datos procedentes de diferentes equipos experimentales

CE24.- Ser capaz de caracterizar transiciones de fase

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:

- Conocimiento de las posibilidades de las diferentes fuentes e instrumentos.
- Montaje de las muestras.
- Planteamiento de la investigación a realizar en función del tipo de muestra: Diseño del experimento, tomad de datos y análisis de los resultados.
- Combinación de datos de diferentes fuentes.
- Estudio de transiciones de fase.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

Descripción del sistema de evalución

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

Ruiz Pérez, Catalina

Catedrática de Física Aplicada
Universidad de La Laguna

Gómez Sal, María Pilar

Profesora Titular de Química Inorgánica
Universidad de Alcalá

Profesorado

Profesor Responsable de la asignatura

BIBLIOGRAFÍA Y ENLACES RELACIONADOS

Bibliografía

Edwards, C. M. "Applications of High-pressure Spectroscopic and Powder X-ray Diffraction" (1971)

Kalliomäki, M. S. "High Pressure X-ray Diffraction Studies by Diamond Anvil Cell Techniques". University of Helsinki (1982)

Eremets, M-I- "High Pressure Experimental Methods". Oxford University Press (1991).

Winter, R. & Jonas, J. "High-pressure molecular science". Nato Science Series. Serie E: Aplied Science Vol. 358 (1998).

Mochheimer, H.D. "Frontiers of high pressure research II: Aplications ofhigh pressure to low-dimensional novel electronic materials". Springer (2001).

Katrusiak, A. & McMillan, P.F. Ed. "High-pressure Crystallography". Kluwer, Dordrecht (2004).

D.R Allan et al . "A high-pressure structural study of propionic acid and the application of CCD detectors in high-pressure single-crystal x-ray diffraction". J. Phys.: Condens. Matter (2000) 12 L613-L618.

D.R. Allan et al. "High pressure co-ordination chemistry of a palladium thioether complex: pressure versus electrons" Chem. Común. (2006) 4081 – 4083.

D. Huang et al. "High-pressure recrystallisation—a route to new polymorphs and solvates of acetamide and parabanic acid" J. Crystal Growth (2005) 275, 185-192.