



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
PROGRAMA DE  
MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS  
DENOMINACIÓN DE LA ENTIDADES PARTICIPANTES  
Programa de actividad académica



Nombre de la asignatura: Temas selectos – Resolución y refinamiento de estructuras cristalinas a través de difracción de rayos X de monocristal.

|                                |           |                                   |                     |                       |    |
|--------------------------------|-----------|-----------------------------------|---------------------|-----------------------|----|
| Clave:                         | Semestre: | Campo de conocimiento: Química    | No. Créditos: 6     |                       |    |
| Carácter: Optativa de elección |           | Horas por semana                  | Total horas/ semana | Total horas/ semestre |    |
| Tipo: TEÓRICO PRÁCTICO         |           | Teoría:                           | Práctica:           | 3                     | 48 |
|                                |           | 1.5                               | 1.5                 |                       |    |
| Modalidad: CURSO               |           | Duración del programa: 16 semanas |                     |                       |    |

Actividad académica con seriación antecedente: Simetría molecular, Difracción de Rayos X o equivalente

Objetivo general: Los alumnos aprenderán resolver, refinar y interpretar estructuras cristalinas utilizando la técnica de difracción de rayos X de monocristal

Objetivos específicos:

Los alumnos aprenderán a:

Procesar los datos obtenidos por difracción de rayos X de monocristal utilizando los programas SAINT, SADABS y XPREP

Resolver estructuras cristalinas utilizando métodos directos, el método de Paterson y métodos de espacio dual utilizando los programas SHELXS, SHELXM, SHELXT

Refinar estructuras cristalinas utilizando el programa SHELXL

Los conceptos básicos de refinamiento de desorden y tratamiento de datos obtenidos desde cristales gemelo utilizando los programas CELL\_NOW y TWINABS

Preparación de archivos CIF para su publicación

Discutir estructuras cristalinas

Índice temático

| Unidad                    | Tema   | Horas    |           |
|---------------------------|--|----------|-----------|
|                           |  | Teóricas | Prácticas |
| 1                         | Conceptos básicos de difracción de rayos X   | 1.5      | 1.5       |
| 2                         | Colección de datos y su procesamiento  | 4.5      | 4.5       |
| 3                         | Resolución de estructuras cristalinas  | 3        | 3         |
| 4                         | Refinamiento de estructuras cristalinas  | 7.5      | 7.5       |
| 5                         | Conceptos básicos de tratamiento de desorden y procesamiento de datos de cristales tipo gemelo | 6        | 6         |
| 6                         | Interpretación de los resultados   | 1.5      | 1.5       |
| Total de horas teóricas:  |  | 24       |           |
| Total de horas prácticas: |  | 24       |           |
| Suma total de horas:      |  | 48       |           |

Contenido Temático

| Unidad | Tema y subtemas   |
|--------|---|
| 1      | Simetría cristalográfica<br>Espacio recíproco<br>Ausencias sistemáticas<br>Problema de fases y métodos para su resolución   |
| 2      | Colección y evaluación de datos – manejo del programa APEX 3<br>Determinación de la red de Bravais, grupo de Laue, sistema cristalino y de la celda unitaria<br>Corrección de la absorción – manejo del programa SADABS<br>Determinación del grupo espacial – manejo del programa XPREP<br>Archivos hkl, ins y res  |
| 3      | Métodos directos y el método de Paterson<br>Método de espacio dual<br>Manejo de programas SHELXS, SHELXD y SHELXT   |
| 4      | Manejo de programas SHELXL<br>Refinamiento anisotrópico<br>Tratamiento de átomos de hidrógeno<br>Archivo CIF y su preparación para publicación  |
| 5      | Definición de desorden<br>Constricciones y restricciones, variables libres<br>Desorden sobre posición general y posición especial<br>Definición de cristales gemelos y los efectos generados<br>Tratamiento de gemelos racémicos<br>Tratamiento de gemelos pseudomeroedrales<br>Tratamiento de gemelos no-meroedrales, archivo HKLF5 – manejo de programas CELL_NOW y TWINABS |
| 6      | Interpretación de los resultados  |

**Bibliografía básica actualizada:**

Crystal Structure Refinement: A Crystallographer's Guide to SHELXL. Peter Müller, Regine Herbst-Irmer, Anthony Spek, Thomas Schneider, Michael Sawaya  
Crystal Structure Determination, Werner Massa, Robert O. Gould  
The SHELXL-97 manual <http://shelx.uni-ac.gwdg.de/SHELX/shelx.pdf>  
APEX 2 user manual (disponible con los programas y la licencia)

**Bibliografía complementaria:**

Fundamentals of crystallography, Carmelo Giacovazzo

**Sugerencias didácticas:**

|                                   |     |
|-----------------------------------|-----|
| Exposición oral                   | (X) |
| Exposición audiovisual            | (X) |
| Ejercicios dentro de clase        | (X) |
| Ejercicios fuera del aula         | (X) |
| Seminarios                        | ( ) |
| Lecturas obligatorias             | (X) |
| Trabajo de investigación          | ( ) |
| Prácticas de taller o laboratorio | ( ) |
| Prácticas de campo                | ( ) |
| Otras: _____                      | ( ) |

**Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:**

|  |       |
|--|-------|
| Exámenes parciales                       | ( )   |
| Examen final escrito                     | (50%) |
| Trabajos y tareas fuera del aula         | (20%) |
| Exposición de seminarios por los alumnos | (20%) |
| Participación en clase                   | (10%) |
| Asistencia                               | ( )   |
| Seminario                                | ( )   |
| Otras:                                   | ( )   |

**Título de la asignatura:** Temas selectos – RESOLUCIÓN Y REFINAMIENTO DE ESTRUCTURAS CRISTALINAS A TRAVÉS DE DIFRACCIÓN DE RAYOS X DE MONOCRISTAL.

**Imparten:** Dr. Diego Martínez Otero y Dr. Vojtech Jancik

**Horario:** martes y jueves: 15:00–16:30

**Requisitos:** Haber cursado y aprobado Teoría de Difracción de Rayos X o equivalente y tener conocimientos de simetría molecular, contar con una computadora capaz de correr programas de Windows o de Linux (puede ser dentro de una máquina virtual).

**Cupo:** 12 alumnos, no se aceptan oyentes, alumnos necesitan ser inscritos todo el semestre.

**Modalidad:** virtual utilizando las plataformas ZOOM y Google Classroom