

- I. Fundamentos de la difracción de rayos X
 - a. Rayos X.
 - i. Colimación y monocromatización
 - ii. Interacción de los rayos X con la materia
 - iii. Detección
 - b. Cristal.
 - i. Red cristalina. Celda unidad.
 - ii. Sistemas cristalinos. Redes de Bravais.
 - c. Difracción de rayos X
 - i. Dispersión y difracción de rayos X
 - ii. Planos e índices de Miller. Ecuaciones de Laue.
 - iii. Ley de Bragg
 - iv. Red recíproca. Esfera de Ewald. Geometría de la difracción.
 - d. Simetría cristalina
 - i. Elementos de simetría.
 - ii. Grupos puntuales. Clases cristalinas. Grupos espaciales.
 - iii. Tablas Internacionales de Cristalografía
 - e. Factores de estructura
 - i. Síntesis y transformada de Fourier. Factores atómicos de forma. Factores de desplazamiento atómico.
 - ii. Extinciones sistemáticas.
 - iii. Ley de Friedel. Dispersión anómala.
 - iv. Función de Patterson
- II. El proceso de determinación estructural
 - a. Cristalización
 - i. Consideraciones generales
 - ii. Métodos de cristalización y optimización de los cristales
 - iii. Transporte y manipulación
 - b. Selección y montaje de un cristal.
 - i. Caracterización y selección de un monocristal
 - ii. Montaje del cristal
 - c. Medida de los datos de difracción
 - i. Difractómetros de rayos X
 1. Descripción: generador, sistemas refrigeración, dispositivos ópticos, goniómetros y detectores
 2. Aspectos prácticos de uso
 - ii. Preparación estrategia de medida. Parámetros a considerar
 1. Ángulo oscilación. Distancia del detector.
 2. Tiempo de exposición
 3. Resolución máxima (y mínima, en algunos casos)
 4. Necesidad de medir los pares de Friedel
 5. Completitud y redundancia óptimas
 - d. Procesado/Reducción de los datos
 - i. integración de la intensidad de las reflexiones
 1. Tamaño de la caja de integración
 2. Ajuste de perfil tridimensional
 3. Tratamiento de las reflexiones parciales
 4. Resumen de la descripción estadística de los datos
 - ii. Factores de Lorentz y polarización
 - iii. Absorción
 - iv. Decaimiento
 - v. Escalado y reducción.
 - vi. Estadísticas finales y recopilación de la información previa requerida para la resolución estructural
 - e. Resolución de la estructura
 - i. Problema de la fase

- ii. Metodologías de resolución
 1. Métodos directos
 2. Métodos de Patterson
 3. Métodos *intrínsecos* (SHELXT)
 4. Reemplazado molecular y otros usados en estructura de macromoléculas
- iii. Modelo inicial
 1. Completado de la estructura
 2. Aplicación de las síntesis de Fourier (Fo, Fo-Fc, 2Fo-Fc)
- f. Refinado de la estructura
 - i. Modelos atómicos. Tratamiento de los hidrógenos.
 - ii. Metodología de los mínimos cuadrados
 1. Restricciones geométricas
 2. Esquemas de pesado
 3. Factores de acuerdo y otros indicadores del ajuste
 4. Extinción secundaria.
 - iii. Determinación de la configuración absoluta. Parámetros x (Flack) e y (Hooft).
 - iv. Mapas de densidad electrónica. Densidad electrónica residual.
 - v. Casos especiales
 1. Estructuras desordenadas. Desorden estático y dinámico.
 2. Maclas. Tipos y soluciones posibles para completar el refinamiento de la estructura.
 3. Pseudosimetría
 4. Estructuras moduladas conmensuradas e inconmensuradas
- g. Validación
 - i. Procedimiento estandarizado por la IUCr (CheckCIF)
 - ii. Ejemplos de alertas más frecuentes y representativas
- h. Archivo del resultado final
 - i. Local
 - ii. En la nube. "Open Access" (OpenAIRE, Zenodo)
 - iii. Depósito en Bases de Datos especializadas
 1. ICSD
 2. CSD
 3. PDB
- III. Interpretación y presentación de resultados
 - a. Distancias, ángulos de enlace y ángulos de torsión
 - b. Interacciones intermoleculares (enlace de hidrógeno, interacciones en el sistema π , etc.)
 - c. Representación de la geometría molecular y celda unidad
 - d. Representación de poliedros de coordinación
 - e. Representación de interacciones intermoleculares
 - f. Representación de la estructura electrónica y cristalina