



**PRIMER EJERCICIO DEL PROCESO SELECTIVO DE
T.G.S. DIFRACCIÓN DE RAYOS
DE LA UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID**

PRUEBA TEORICA

Concurso-Oposición Libre (Convocatoria excepcional de estabilización de empleo temporal de larga duración). Resolución 16 de noviembre de 2022

Madrid, 11 de mayo de 2023



1. **De los siguientes beneficios sobre la preparación de muestras por fusión (perlas) para el análisis por fluorescencia de rayos x, indicar cuál es incorrecto.**
 - a) Se eliminan todos los efectos de matriz entre los elementos de la muestra.
 - b) Se eliminan los efectos derivados del tamaño de partícula.
 - c) La preparación de patrones artificiales es más sencilla que con muestras de polvo prensadas.
 - d) Los efectos de matriz son menores que para las pastillas de polvo prensadas.
2. **Se entiende por riesgo laboral grave e inminente:**
 - a) Aquel que resulte probable racionalmente que se materialice en un futuro inmediato y pueda suponer un daño grave para la salud de los trabajadores
 - b) Aquel que resulte cierto racionalmente que se materialice en un futuro inmediato y pueda suponer un daño grave para la salud de los trabajadores
 - c) Aquel que resulte probable racionalmente que se materialice en un futuro mediano y pueda suponer un daño grave para la salud de los trabajadores
 - d) Aquel que resulte probable racionalmente que se materialice en un futuro inmediato o pueda suponer un daño grave para la salud de los trabajadores
3. **¿Qué es y qué indica el factor Rint que se calcula para los datos de difracción de rayos x de monocristal?**
 - a) Es un parámetro que mide la bondad del refinamiento estructural, que será mejor para valores pequeños de este parámetro
 - b) Es un parámetro que mide la calidad de los datos al comparar las desviaciones de posición angular para reflexiones equivalentes respecto a su posición promedio. Cuanto menor sea su valor, mejores serán los datos
 - c) Es un parámetro que mide la calidad de los datos al comparar las desviaciones de intensidad para reflexiones equivalentes respecto a su intensidad promedio. Cuanto menor sea su valor, mejores serán los datos
 - d) Es un parámetro que se calcula durante el refinamiento por mínimos cuadrados. El refinamiento se da por terminado cuando ya no se puede reducir más su valor
4. **¿Cómo se define la resolución en un difractómetro de polvo o policristal?**
 - a) Es el tamaño de paso angular más pequeño que puede moverse el goniómetro
 - b) Es el espaciado más pequeño que se puede medir en el equipo
 - c) Es la capacidad de separar dos o más reflexiones próximas
 - d) Es el espaciado más grande que se puede medir en el equipo
5. **De las siguientes afirmaciones sobre los espectrómetros de fluorescencia de rayos x por dispersión de longitudes de onda, indicar cuál es incorrecta.**
 - a) La muestra se sitúa en el eje del goniómetro y gira a la mitad de velocidad que el cristal analizador y el detector
 - b) Las líneas características de cada elemento aparecen siempre en valores fijos de 2θ que dependen del cristal analizador.
 - c) La muestra está fija durante la medida y próxima al tubo de rayos x
 - d) Se pueden seleccionar diferentes rangos de energía cambiando el cristal analizador

6. **Para efectuar una recogida de datos completa en un difractómetro con goniómetro de 3 círculos y detector de área**
- Se pueden programar barridos en 2θ o en ω , en función del tipo de muestra
 - Se pueden programar barridos en χ o en ϕ , según sea el tamaño de la celdilla
 - Se pueden programar barridos en ω o en ϕ , aunque la práctica más común es la primera
 - Los barridos de difracción de rayos x son siempre en 2θ
7. **Respecto a un difractómetro de monocristal con detector de área, ¿cuál de las siguientes afirmaciones es correcta?**
- No es necesario modificar la distancia cristal-detector definida en fábrica en ningún caso
 - Se deben emplear distancias mayores para cristales con celdilla unidad más grande para minimizar así el solapamiento de las reflexiones
 - Se deben emplear distancias menores para cristales con celdilla unidad más grande para minimizar así el solapamiento de las reflexiones
 - Se deben emplear distancias mayores con cristales más grandes para evitar la saturación del detector
8. **Al refinar la estructura de un compuesto a partir de datos de difracción de rayos x de monocristal, ¿qué reflexiones se deben utilizar?**
- Se deben descartar las reflexiones incluidas en las capas de menor resolución cuando tienen valores más altos de I/σ (aproximadamente >2) y más bajos de R_{int} (aproximadamente 0.45) porque se consideran ruido
 - Se deben utilizar todas las reflexiones medidas
 - Se deben descartar las reflexiones con menor intensidad porque se consideran ruido
 - Se deben descartar las reflexiones incluidas en las capas de mayor resolución cuando tienen valores más bajos de I/σ (aproximadamente 2) y más altos de R_{int} (aproximadamente >0.45) porque se consideran ruido
9. **En un fichero con extensión “ins” para el programa SHELXL, la instrucción “HKLF”, ¿qué significa y dónde debe ir colocada?**
- Debe ser la primera instrucción del fichero y debe indicar el nombre del fichero con las reflexiones
 - Debe ser la última instrucción del fichero e indicar el tipo de fichero de reflexiones que se va a proporcionar
 - No importa la posición, pero debe ir seguida del tipo de fichero de reflexiones que se va a utilizar
 - Debe aparecer inmediatamente después del título e indicar el nombre del fichero de reflexiones
10. **Los Delegados de Prevención serán designados:**
- Por el empresario
 - Por los técnicos de Prevención
 - Por los trabajadores entre los representantes de los trabajadores
 - Por y entre los representantes de los trabajadores
11. **Cuando tras un refinamiento estructural se obtiene un valor del parámetro de Flack próximo a 1, ¿cuál de las siguientes afirmaciones es correcta?**
- Se trata de una estructura centrosimétrica
 - Hay que invertir el modelo estructural para obtener la estructura correcta
 - Se ha completado el refinamiento
 - Se ha determinado correctamente la configuración absoluta
12. **¿Cómo podemos identificar y refinar el desorden posicional de varios átomos sobre dos posiciones en una estructura de molécula pequeña con el programa para refinamiento del paquete de programas SHELX?**
- Refinando el factor de ocupación de los átomos implicados mediante el comando DISO
 - Delimitando los grupos de átomos implicados con instrucciones DISO y refinando una variable libre FVAR para el factor de ocupación de las partes que afectará al conjunto de átomos implicados
 - Delimitando los grupos de átomos implicados con instrucciones PART y refinando una segunda variable libre para el factor de ocupación de las partes a la que deberán referirse en sus descripciones todos los átomos implicados
 - Delimitando los grupos de átomos implicados con instrucciones SOF y refinando una segunda variable libre para el factor de ocupación de los grupos

13. **¿Para qué se incluye el comando ACTA en el fichero de instrucciones que controla el programa SHELXL?**
- Para indicar al programa SHELXL que se deben actualizar las posiciones atómicas
 - Para indicar al programa SHELXL que genere un fichero con la información cristalográfica con extensión cif
 - Para indicar al programa SHELXL que se deben actualizar todos los parámetros del refinamiento
 - Para indicar al programa SHELXL que genere un fichero con las tablas de distancias interatómicas actualizadas con extensión act
14. **En el proceso de medida, determinación y refinamiento de estructuras por difracción de rayos x de monocristal, ¿en qué momento y para qué se puede emplear la herramienta PLATON SQUEEZE?**
- En el diseño de la estrategia de medida, para evitar la redundancia en el registro de intensidades y acortar los tiempos de medida
 - Durante el refinamiento estructural, para eliminar la contribución a los factores de estructura del disolvente desordenado localizado en la estructura
 - Durante la determinación estructural, para localizar los átomos de hidrógeno en la unidad asimétrica
 - Durante la reducción de datos, para garantizar la correcta extracción de intensidades cuando el cristal medido es una macla
15. **¿En qué consiste el conocido como “Método de Flack” en el tratamiento de datos de difracción de rayos x?**
- Es un método para determinar la configuración absoluta de la estructura a partir de datos de difracción de rayos x de monocristal
 - Es un método de determinación de estructuras ab initio a partir de datos de difracción de rayos x monocristal
 - Es un método para refinar estructuras cristalinas a partir de datos de difracción de rayos x de monocristal
 - Es un método para refinar estructuras cristalinas a partir de datos de difracción de rayos x de polvo (policristal)
16. **Si en un fichero de instrucciones para el programa SHELXL se incluye la instrucción HKLF 4, ¿qué le estamos indicando al programa?**
- Que el fichero de reflexiones incluye 4 parámetros por reflexión, siendo los tres primeros los índices hkl
 - Que el fichero de reflexiones incluye valores de factores de estructura al cuadrado
 - Que el fichero de reflexiones incluye valores de factores de estructura con cuatro posiciones decimales
 - Que el fichero de reflexiones incluye los factores de estructura al cuadrado de cuatro dominios que deben ser tratados como una macla
17. **Cuando se trabaja con estructuras de compuestos orgánicos con el programa SHELXL, se deben reportar los posibles enlaces de hidrógeno. ¿Qué comandos se usan para ello?**
- El comando HTAB para examinar la presencia de posibles enlaces para incluir las nuevas instrucciones HTAB donor-atom acceptor-atom en el siguiente ciclo de refinamiento junto con el comando ACTA
 - El comando HTAB para localizar los enlaces de hidrógeno y el comando RTAB para refinar las posiciones de los hidrógenos para poder reportarlos con el comando ACTA
 - El comando HTAB para localizar los átomos de hidrógeno en la estructura y seleccionar después los hidrógenos implicados en los enlaces de hidrógeno
 - El comando RTAB donor-atom acceptor-atom para refinar los enlaces de hidrogeno y el comando HTAB para incluir los resultados con la estructura final
18. **Respecto al uso de la geometría de haz paralelo en un difractómetro de polvo o policristal, qué afirmación es correcta**
- Solo se emplea en medidas de incidencia rasante
 - Evita los efectos del ajuste en altura de la muestra en la anchura de los picos
 - Evita los efectos del ajuste en altura de la muestra en la anchura y la asimetría de los picos
 - Evita los efectos del ajuste en la altura de la muestra en la posición de los picos
19. **Respecto de un difractómetro de rayos x con geometría Bragg-Brentano, cuál de las siguientes afirmaciones es correcta**
- El radio del círculo de enfoque cambia con el ángulo 2θ del goniómetro
 - El radio del goniómetro coincide con el radio del círculo de enfoque en los barridos simétricos
 - El radio del círculo de enfoque es menor para ángulos 2θ más bajos
 - El radio del círculo de enfoque es constante e independiente del radio del goniómetro

- 20. Cómo se consigue la determinación del grupo espacial de una fase cristalina a partir de un experimento de difracción de rayos x de monocristal**
- a) Mediante la determinación de la clase de Laue del diagrama de difracción
 - b) Mediante la determinación de los parámetros de celdilla a partir del diagrama de difracción considerando el centrado de la celdilla para establecer la red de Bravais
 - c) Determinando la clase de Laue y las extinciones sistemáticas presentes en el diagrama de difracción, pero no siempre se obtiene un grupo espacial único
 - d) El grupo espacial que puede generar un diagrama de difracción es único y se determina mediante el análisis de las extinciones sistemáticas observadas

PREGUNTAS DE RESERVA

- 21. Respecto a los equipos de protección, señale cual es de las siguientes afirmaciones no es correcta:**
- a) El EPI no tiene por finalidad realizar una tarea o actividad, sino protegernos de los riesgos que la tarea presenta
 - b) El EPI debe ser un elemento de protección para el que lo utiliza, no para la protección de productos o personas ajenas
 - c) La utilización de los EPI queda reservada para los trabajadores encargados de dicha utilización
 - d) El EPI debe ser utilizado por el trabajador, anteponiéndolo siempre a la protección
- 22. En un análisis por fluorescencia de rayos x, ¿qué se entiende por fluorescencia secundaria?**
- a) La radiación de fluorescencia generada en cristal analizador del espectrómetro y que hay que filtrar
 - b) La radiación de fluorescencia producida por la interacción de la radiación generada en los átomos de la muestra con otros átomos de la muestra
 - c) La radiación de fluorescencia generada por los átomos que no se quieren analizar y que pueden interferir en la medida
 - d) La radiación de fluorescencia producida por la dispersión Compton que se genera en la muestra
- 23. Respecto a las medidas de las intensidades de las reflexiones en difracción de rayos x de monocristal, ¿qué se cumple generalmente?**
- a) Los valores de I/σ crecen en las capas de mayor resolución, mientras que los valores de R_{int} decrecen
 - b) Tanto los valores de I/σ como los valores de R_{int} aumentan en las capas de mayor resolución
 - c) Los valores de I/σ decrecen en las capas de mayor resolución, mientras que los valores de R_{int} crecen
 - d) Tanto los valores de I/σ como los valores de R_{int} disminuyen en las capas de mayor resolución
- 24. De acuerdo con la Ley 31/1995, de 8 de noviembre, de prevención de Riesgos Laborales, ¿qué se entiende por equipo de trabajo?**
- a) Cualquier máquina, aparato, instrumento o instalación utilizada en el trabajo
 - b) Los equipos de protección individual
 - c) La ropa de trabajo
 - d) Todas son correcta
- 25. Cuando se utiliza un espejo focalizador en el haz incidente de un difractómetro que trabaja con un tubo de Cu, ¿qué filtro KBeta se debe utilizar?**
- a) Un filtro de Ni situado en la óptica de haz incidente
 - b) Un filtro de Ni situado en la óptica de haz incidente o en la de haz difractado
 - c) No es necesario utilizar este tipo de filtros
 - d) Un filtro de Zr situado en la óptica de haz incidente o en la de haz difractado