

Prácticas de laboratorio de cristalografía fundamental y cálculo cristalográfico II

**MÁSTER UNIVERSITARIO EN CRISTALOGRAFÍA Y
CRISTALIZACIÓN**

UNIVERSIDAD INTERNACIONAL MENÉNDEZ PELAYO

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 II - Investigación tutelada**, del que forma parte esta asignatura, consiste en la realización de un período de prácticas en un laboratorio de Cristalización/Cristalografía cuya experiencia y líneas de trabajo se adecuen a los intereses temáticos del alumno. Se han definido cinco líneas temáticas y, dentro de ellas, varios laboratorios elegibles:

- Prácticas de laboratorio de cristalización I y II
- Prácticas de laboratorio de cristalografía química y de materiales I y II
- Prácticas de laboratorio de cristalografía molecular I y II
- Prácticas de laboratorio de cristalografía fundamental y cálculo cristalográfico I y II
- Prácticas de laboratorio de cristalografía en grandes instalaciones I y II

Las actividades de cada una de estas asignaturas se desarrollan durante un mes de estancia en el laboratorio seleccionado y corresponde a 7 ECTS. Cada línea temática ofrece dos asignaturas (numeradas I y II) correspondientes a estancias de "iniciación" y "avanzada" en cada laboratorio. Los alumnos deben seleccionar dos asignaturas de este módulo para completar los 14 créditos requeridos, pudiendo ser estas dos "iniciaciones" o una "iniciación" y la "avanzada" correspondiente. Durante su estancia en el laboratorio seleccionado, los estudiantes iniciarán el trabajo experimental necesario para la realización de su Trabajo de fin de Máster. La selección de optativas del Módulo II debe ser aprobada por el Coordinador Académico del Máster tras comprobar la coherencia de la selección realizada por el alumno dentro de este Módulo y con respecto a las optativas seleccionadas en el Módulo III.

El acceso a grandes instalaciones científicas lleva aparejado un proceso de acreditación y formación en seguridad radiológica. El acceso a generadores de neutrones está prohibido a embarazadas. El acceso a instalaciones de radiación sincrotrón está prohibido a usuarios de marcapasos. Todos estos hechos se harán constar en la documentación impresa y *on-line* del Máster y se comunicarán personalmente a los alumnos matriculados.

La aplicación de los conocimientos teóricos en cristalografía y cristalización adquiridos en el Módulo I del Máster requiere un complemento de puesta en marcha, adquisición de destrezas en las técnicas y profundización en la aplicación práctica del aprendizaje adquirido.

En la asignatura de **prácticas de laboratorio de cristalografía fundamental y cálculo cristalográfico** se pone un especial énfasis en la computación y en los desarrollos metodológicos relativos a la resolución de estructuras y la caracterización en ciencia de

materiales a micro y nanoescalas.

Los objetivos de aprendizaje de la asignatura son los siguientes:

- Conocer y manejar el *software* cristalográfico actual y los algoritmos existentes.
- Conocer y manejar los sistemas operativos y los lenguajes de programación mas utilizados.
- Adquirir la capacidad de programar *software* para aplicaciones cristalográficas.

Título asignatura

Prácticas de laboratorio de cristalografía fundamental y cálculo cristalográfico II

Código asignatura

101170

Curso académico

2016-17

Planes donde se imparte

[MÁSTER UNIVERSITARIO EN CRISTALOGRAFÍA Y CRISTALIZACIÓN](#)

Créditos ECTS

7

Carácter de la asignatura

OPTATIVA

Duración

Anual

Idioma

Inglés

CONTENIDOS

Contenidos

Se describen a continuación los contenidos comunes a las asignaturas de Prácticas de laboratorio de cristalografía fundamental y cálculo cristalográfico I y II y específicos a cada uno de los laboratorios:

Contenidos comunes

Programación de aplicaciones cristalográficas, uso de librerías científicas, bases de datos cristalográficas, algoritmos para el cálculo cristalográfico y para la resolución/refinado de estructuras cristalinas.

Contenidos específicos

1) Laboratorio de Cristalografía de la Universidad de Oviedo

- Manejo de software cristalográfico actual.
- Aspectos de sistemas operativos y lenguajes de programación relevantes para el cálculo cristalográfico.
- Programación de aplicaciones cristalográficas utilizando librerías accesibles públicamente.

2) Istituto di Cristallografia (CRN, Bari, Italia)

- Metodologías cristalográficas para química estructural, ciencia de materiales y biología estructural.
- Desarrollo de *software* para proceso de datos experimentales y resolución estructural.
- Métodos de faseado.

3) Departamento de Física de la Materia Condensada de la Universidad del País Vasco

- Metodología para el análisis mediante difracción de rayos X.
- Métodos basados en teoría de grupos.

- Transiciones de fase.
- Servicios Web de cálculo cristalográfico.

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

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

CE1.- Ser capaz de identificar, describir y clasificar la simetría de acuerdo a la terminología estandar internacional

CE2.- Comprender la naturaleza y propiedades del sólido cristalino y las implicaciones de las mismas para diferentes disciplinas

CE3.- Comprender cómo las diferentes unidades atómicas y moleculares interactúan, se asocian y disponen para constituir una red cristalina

CE4.- Entender y valorar artículos científico-técnicos de revistas especializadas en cristalografía y cristalización

CE17.- Saber organizar grupos de trabajo (y participar ellos) para la realización de experimentos complejos

CE35.- Ser capaz de solucionar problemas computacionales mediante el uso de librerías cristalográficas y lenguajes de scripting

CE36.- Ser capaz de desarrollar software cristalográfico básico para su utilización por terceros

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.

AF12.- Trabajo en grupo.

Resultados de aprendizaje

La formación práctica que se propone en el Módulo II - Investigación tutelada, del que forma parte esta asignatura, debe basarse en unos conocimientos teóricos adquiridos con anterioridad en el Módulo I, que permitan que el alumno pueda plantearse un problema y proponer soluciones sirviéndose de una serie de instrumentos experimentales, de cálculo y bibliográficos, utilizando una metodología adecuada, todo ello bajo la tutela y supervisión del profesorado de prácticas y con la ayuda del personal científico y técnico del grupo de investigación.

Los objetivos de aprendizaje transversales propuestos son que el alumno:

- Desarrolle las competencias necesarias para incorporarse a un grupo de trabajo multidisciplinar (sobre todo habilidades personales, de trabajo en equipo y de comunicación).
- Adquiera destrezas transversales como aprender a utilizar información científica, presentar resultados, etc.
- Aprenda a implementar y a valorar las medidas de seguridad y protección del laboratorio.
- Aprenda a aplicar los conocimientos fundamentales aprendidos en el Módulo I para el análisis, interpretación y discusión crítica de los datos obtenidos.
- Aprenda a organizar los resultados de investigación en forma de informes y,

posteriormente, redactar en base a ellos un artículo científico especializado, incluyendo la preparación de ilustraciones, la discusión de resultados y el uso de bibliografía.

- Aprenda a presentar y discutir sus resultados oralmente en seminarios y a presentar los materiales audiovisuales oportunos para una presentación eficaz.

Esta asignatura tiene, además, unos objetivos específicos relacionados con el tipo de actividad científicotécnica, en particular, se pretende que el alumno:

- Adquiera los conocimientos y habilidades necesarias para el trabajo experimental en un laboratorio de cristalografía fundamental: cálculo cristalográfico, desarrollo y prueba de metodologías de proceso de datos, resolución y refinamiento estructural, desarrollo de librerías, bases de datos y servicios web y aplicación de métodos de cálculo a problemas cristalográficos.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

Descripción del sistema de evaluación

Sistema de evaluación (ponderación mínima y máxima %)

- Realización de prácticas y/o cuaderno de prácticas (40%-60%)
- Realización y presentación de trabajos e informes (40%-60%)
- Participación en seminarios (10%-20%)

Calendario de exámenes

- El examen de la asignatura se realizará al final de la última semana de prácticas del estudiante.

PROFESORADO

Profesor responsable

García Granda, Santiago

*Catedrático de Química Física
Universidad de Oviedo
Presidente de la European Crystallographic Association*

Profesorado

Profesor Responsable de la asignatura

BIBLIOGRAFÍA Y ENLACES RELACIONADOS

Bibliografía

XD2006, A Computer Program Package for Multipole Refinement, Topological Analysis of Charge Densities and Evaluation of Intermolecular Energies from Experimental and Theoretical Structure Factors, Volkov, A.; Macchi, P.; Farrugia, L. J.; Gatti, C.; Mallinson, P.; Richter, T.; Koritsanszky, T. (2006). <http://xd.chem.buffalo.edu/>

AIM2000, Version 2.0, Copyright 2002, Program designed by Friedrich Biegler-König and Jens Schönbohm, Chemical advice by R.F.W. Bader, McMaster University, Hamilton, Canada.
<http://www.aim2000.de/about-aim2000.htm>.

MORPHY, a program for an automated "atoms in molecules" analysis, Popelier, Paul L. A. Computer Physics Communications, vol. 93, Issue 2-3, pp.212-240.

MolFinder, in DIRDIF99 program system. P. T. Beurskens, G. Beurskens, W. P. Bosman, R. de Gelder, S. Garcia-Granda, R. O. Gould, R. Israel and J. M. M. Smits, Crystallography Laboratory, University of Nijmegen, The Netherlands. 1999. A procedure towards the automatic solution of crystal structures by means of topological analysis of Fourier maps, Menéndez-Velázquez, Amador and García-Granda, Santiago, Journal of Applied Crystallography, 36(2), 193-205 (2003).