

# Cristalografía en grandes instalaciones

**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 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, en esta 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.

La formación impartida en la asignatura de **Cristalografía en grandes instalaciones** está orientada a facilitar a los alumnos el acceso a grandes instalaciones para experimentación avanzada en su vida investigadora o profesional.

El objetivo de la asignatura es formar a los alumnos en:

- Las posibilidades y peculiaridades de la experimentación en grandes instalaciones.
- El diseño de experimentos en grandes instalaciones.
- Los procedimientos para solicitar experimentos en grandes instalaciones y preparar los informes requeridos tras el experimento.
- La metodología de trabajo en grandes instalaciones así como experiencias menos tangibles como el ambiente y el ritmo de trabajo.
- Los requerimientos de seguridad para realizar experimentos en grandes instalaciones.

Es también objetivo de la asignatura formar científicos capaces de rentabilizar para la ciencia española las grandes instalaciones de uso en cristalografía participadas por España como el nuevo sincrotrón Alba de Barcelona, el ESRF o el ILL.

**Título asignatura**

Cristalografía en grandes instalaciones

**Código asignatura**

101173

**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 organizan entorno a:

- **Temas teóricos** sobre las características de las fuentes de radiación sincrotrón y de neutrones y cómo utilizar estas características para realizar experimentos no convencionales en cristalografía. Experimentación en líneas de sincrotrón. Propiedades de las fuentes de radiación sincrotrón y su utilización práctica. Experimentos que son solo posibles en una línea de sincrotrón. Experimentación en líneas de neutrones. Propiedades de las fuentes de neutrones y su utilización práctica. Experimentos que son solo posibles en una línea de neutrones.
- **Visitas guiadas a las instalaciones.** Se visitarán las fuentes de radiación (el anillo acelerador del ESRF y el reactor del ILL) y una selección de líneas experimentales de ambos centros. Visita al anillo acelerador del ESRF y al reactor del ILL. Generación de fotones y neutrones en grandes instalaciones. Elementos de inserción. Visita a líneas de sincrotrón y de neutrones. Descripción y especificaciones de los elementos de las líneas.
- **Sesión práctica sobre cómo solicitar el acceso a líneas de sincrotrón y neutrones** para la realización de experimentos y sobre cómo preparar los informes necesarios tras la realización de los experimentos. Cómo preparar una solicitud de tiempo de haz exitosa. Como preparar informes oficiales tras los experimentos.
- **Sesión práctica sobre los elementos de seguridad de las instalaciones.** Normas de seguridad para el trabajo en fuentes de radiación y fuentes de neutrones.
- **Sesiones prácticas durante la realización de experimentos reales tutelados en condiciones de trabajo nominales en grandes instalaciones.** Experimento de difracción de neutrones mediante el método de polvo, monocristal o bajo ángulo. Experimento de difracción de bajo ángulo, monocristal, polvo XAFS en BM25. Tanto las líneas de difracción del ILL como la línea BM25 del ESRF permiten utilizar diferentes técnicas experimentales. Esta flexibilidad se utilizará para seleccionar los experimentos a realizar en función de su interés formativo teniendo en cuenta la orientación de los alumnos.

## CONOCIMIENTOS PREVIOS REQUERIDOS

- Los alumnos deberán haber cursado la materia "Métodos de difracción" del Módulo I.
- Para esta asignatura, también serán necesarios conocimientos básicos previos de matemáticas (cálculo, álgebra, geometría) y física a nivel de primer ciclo universitario (electromagnetismo, estructura electrónica de la materia).

- La docencia se impartirá en inglés, por lo que un conocimiento adecuado de este idioma es indispensable para el seguimiento de los contenidos.
- Aunque no es requisito imprescindible, los conocimientos previos sobre el uso de estaciones de trabajo UNIX, cálculo con ordenadores y/o programación es muy conveniente.

## COMPETENCIAS

### Generales

CG1.- Capacidad de análisis y síntesis

CG2.- Resolución de problemas

CG3.- Trabajo en un equipo de carácter 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

## 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.

### Metodologías docentes

Esta asignatura se impartirá en el complejo científico de Grenoble donde están ubicados el European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) y el Institute Laue Langevin (ILL) y consistirá en una inmersión en las peculiaridades de la experimentación en grandes instalaciones mediante la participación de los alumnos en dos experimentos reales en líneas de sincrotrón y uno en una línea de neutrones tras la adecuada preparación teórico práctica sobre las características de las fuentes utilizadas.

Se realizarán tres experimentos programados y simultáneos en condiciones reales de trabajo en las instalaciones. Estos experimentos estarán planteados, preparados y tutelados por científicos especialistas en los campos de aplicación respectivos. En una sesión inicial, estos científicos explicarán a los alumnos durante 40 minutos cada uno de los tres casos científicos, así como el diseño experimental previsto para la adquisición de datos, los métodos previstos para el proceso de los datos, los resultados esperados y cualquier consideración particular sobre el experimento y se les entregará copia de la solicitud oficial de tiempo para la realización de los experimentos.

A continuación se realizarán los experimentos en cuatro turnos de 8 horas cada uno. Los alumnos se dividirán en cuatro grupos de entre 2 y 4 alumnos y cada grupo rotará en periodos de 8 horas por los tres experimentos simultáneos, uno de los grupos descansará en cada turno. Durante cada sesión, se explicará a cada grupo la implementación real sobre la línea del

experimento propuesto y la lógica de dicha implementación y se procederá a adquirir y procesar los datos en el régimen de trabajo habitual en la línea. Al final de cada experimento se entregará a los alumnos copia de todos los datos recogidos y procesados de forma preliminar así como indicaciones para realizar cualquier análisis posterior que fuera necesario.

Por el carácter de las instalaciones, existen requerimientos especiales de seguridad. Las principales situaciones de riesgo son el embarazo (en el ILL) o el uso de prótesis ferromagnéticas, en especial marcapasos (en el ESRF). Cualquier alumno que desee cursar la asignatura y se encuentre en alguna de estas situaciones debe exponerlo a su tutor.

Para el acceso de los estudiantes a las instalaciones del ESRF e ILL, los alumnos deberán disponer de un seguro médico adecuado; puede encontrar más información al respecto en su [página web](#).

Así mismo es necesario obtener permiso de acceso al centro y reservar alojamiento. Para todas estas gestiones, los alumnos deberán ponerse en contacto con el coordinador de la asignatura con dos meses de antelación.

## Resultados de aprendizaje

Tras cursar esta asignatura, el alumno debe ser capaz de:

- Identificar los experimentos que requieren el uso de grandes instalaciones.
- Diseñar experimentos para su realización en grandes instalaciones y solicitar oficialmente el tiempo de haz correspondiente.
- Participar en la realización experimentos en sincrotrón y fuentes de neutrones.
- Superar cualquier bloqueo que pueda impedirles plantear experimentos ambiciosos que potencialmente desbordan las capacidades experimentales disponibles.
- Evaluar con un sentido crítico los resultados de investigación obtenidos en grandes instalaciones.

# SISTEMA DE EVALUACIÓN

## Descripción del sistema de evaluación

### 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

**Rubio Zuazo, Juan**

*Científico Titular*

*Laboratorio Europeo de Radiación Sincrotón (ESRF)*

*Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)*

**Castro Castro, Germán Rafael**

*Head of the Spanish Centre for Genomic Regulation (CRG)*

*BN25 SpLine Beamline*

*European Synchrotron Radiation Facility (ESRF)*

### Profesorado

Profesor Responsable de la asignatura

## BIBLIOGRAFÍA Y ENLACES RELACIONADOS

### Bibliografía

- Als-Nielsen J. and McMorrow D. (2001) Elements of Modern X-ray Physics. Wiley.
- Aslanov L.A., Fetisov G.V. and Howard J.A.K. (1998) Crystallographic Instrumentation. Oxford University Press.
- Bacon G.E. (1962) Neutron Diffraction. Oxford
- Bacon G.E. (1963) Application of Neutron Diffraction in Chemistry. Pergamon
- Baruchel J. Hodeau J.L. Lehmann M.S. Regnard and J.R. Schlenker C. (1993) Neutron and Synchrotron radiation for Condensed Matter Studies. (3 volumes). Springer Verlag
- Chatterji T. (2005) Neutron Scattering from Magnetic Materials (Hardcover). Elsevier Science
- Duke P. (2000) Synchrotron Radiation: Production and Properties (Oxford Series on Synchrotron Radiation, 3). Oxford University Press
- Giacovazzo C., Monaco H.L., Artioli G., Viterbo D., Ferraris G., Gilli G. and others (2002) Fundamentals of Crystallography. Oxford University Press.
- Hammond C. (2001) The Basics of Crystallography and Diffraction. Oxford University Press.
- Helliwell J.R. (2005) Macromolecular Crystallography with Synchrotron Radiation. Cambridge University Press.
- Margaritondo G. () Elements of Synchrotron Light: For Biology, Chemistry, and Medical Research. Oxford University Press.
- Wiedemann H. (2002) Synchrotron Radiation. Springer.
- Wilson C.C. (2000) Single Crystal Neutron Diffraction From Molecular Materials. World Scientific.
- Winick E. (2002) Synchrotron Radiation Sources: A Primer (Series on Synchrotron Radiation Techniques and Applications, Vol 1). World Scientific