Resolución y refino de estructuras

MÁSTER UNIVERSITARIO EN CRISTALOGRAFÍA Y CRISTALIZACIÓN

UNIVERSIDAD INTERNACIONAL MENÉNDEZ PELAYO

Másteres Universitarios

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 objetivo de esta asignatura es el establecimiento razonado sobre parámetros estructurales de interpretaciones científicas a las propiedades o comportamientos físicos, químicos o biológicos investigados.

Título asignatura

Resolución y refino de estructuras

Código asignatura

101161

Curso académico

2016-17

Planes donde se imparte

MÁSTER UNIVERSITARIO EN CRISTALOGRAFÍA Y CRISTALIZACIÓN

Créditos ECTS

9

Carácter de la asignatura

OBLIGATORIA

Duración

Anual

Idioma

Inglés

CONTENIDOS

Contenidos

A) Fundamentos matemáticos para la resolución y refino de estructuras

- Lenguajes de programación de uso común en Cristalografía (FORTRAN, PYTHON, etc.).
- Sistemas operativos útiles en Cristalografía estructural (Windows y Linux).
- Herramientas matemáticas aplicadas al ajuste de variables estructurales.
- Estadística y Cristalografía.
- Teoría de errores aplicada a parámetros estructurales.

B) Métodos de resolución de estructuras

- Integración de datos experimentales.
- Correcciones necesarias.
- Métodos matemáticos de resolución de estructuras: Métodos directos, Patterson y otros relacionados.
- Mapas de densidad electrónica aplicados a la resolución estructural.
- Refino estructural.
- Parámetros de desplazamiento térmico. Movimiento molecular.
- Análisis de la estructura absoluta y de la quiralidad molecular.
- Fenómenos de dispersión anómala.
- Programas para la resolución y refino estructural.

C) Validación y análisis de estructuras cristalinas

- Validación de estructuras.
- Criterios y *software* de validación.
- Bases de datos en Cristalografía.

- Relación estructura-actividad a partir de los parámetros estructurales.
- Fuentes bibliográficas estructurales.
- Uso legal de la información Cristalográfíca.
- Patentes.

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

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

CE8.- Ser capaz de definir experimentos optimizados de difracción y metodologias óptimas de recogida y proceso de datos

CE9.- Ser capaz de valorar críticamente un experimento de difracción, la utilidad de los datos obtenidos y las limitaciones de los mismos

CE11.- Ser capaz de usar de forma autónoma el *software* requerido para la resolución y refinamiento de estructuras cristalinas

CE12.- Ser capaz de evaluar de forma crítica la calidad de los datos estructurales y los indicadores estadísticos de calidad asociados a la estructura resuelta

CE13.- Comprender y saber aplicar los fundamentos subyacentes a los diferentes métodos de resolución estructural

PLAN DE APRENDIZAJE

Actividades formativas

AF1.- Clases presenciales activas: Combinación de teoría, problemas cortos, preguntas y discusión con los alumnos.

AF2.- Talleres de resolución de problemas.

AF3.- Talleres prácticos y demostraciones experimentales en el aula.

AF4.- Seminarios.

AF5.- Prácticas de computación y bases de datos.

AF6.- Tutoría individual o grupal.

AF7.- Evaluación.

AF10.- Trabajo autónomo.

AF11.- Visitas a empresa o centro de investigación.

AF12.- Trabajo en grupo.

Resultados de aprendizaje

Los objetivos planteados para el presente curso serán:

- El alumno debe ser capaz de interaccionar con los equipos de cálculo, asociados a equipos de medida o independientes, con conocimiento suficiente tanto a nivel de sistema operativo, como en el contexto de usuario de los paquetes de resolución y refino estructural.
- El alumno debe conocer los criterios estadísticos de calidad para evaluar la bondad de unos datos experimentales y acometer el método de resolución estructural apropiado.
- El alumno debe conocer los detalles conceptuales y prácticos para la extracción de la información experimental de un proceso de difracción.
- El alumno debe ser capaz de realizar el proceso de resolución estructural de compuestos de diferentes tipos, aplicando los programas experimentales más adecuados.
- El alumno conocerá al final del curso los métodos de representación estructural y será capaz de articular sobre los resultados estructurales una interpretación de la actividad o propiedades específicas investigadas.

- Para la normalización de los parámetros estructurales obtenidos, el alumno deberá adquirir un conocimiento profundo de los tipos de bases estructurales existentes, así como de los mecanismos de extracción de información.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

Descripción del sistema de evalución

Sistema de evaluación (ponderación mínima y máxima %)

- Prueba escrita (35%-45%)
- Hojas de problemas (5%-10%)
- Realización de prácticas y/o cuaderno de prácticas (5%-10%)
- Realización y presentación de trabajos e informes (20%-30%)
- Participación en seminarios (10%-20%)
- Participación en clase (5%-10%)

Calendario de exámenes

Asignatura no ofertada en el curso académico 2015-2016

PROFESORADO

Profesor responsable

Lahoz Díaz, Fernando José

Profesor de Investigación
Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH)
Centro Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

Profesorado

Wood , Peter

Cambridge Crystallographic Data Centre

Blake , Alexander

Crystallographer
University of Nottingham

Giacovazzo , Carmelo

Full Professor
University of Bari, Italy

Mata Martínez, Ignasi

Investigador contratado
Instituto de Ciencias de Materiales de Barcelona (ICMAB)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

García Ruiz, Juan Manuel

Profesor de Investigación
Laboratorio de Estudios Cristalográficos (LEC)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

Esteve Cano, José Vicente

Profesor Titular de Química Inorgánica
Universidad Jaume I

Usón Finkenzeller, María Isabel

Profesora de Investigación ICREA
Instituto de Biología Molecular de Barcelona (IBMB)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

Cooper , Richard

Professor of Chemistry
University of Oxford

Friese , Karen

Senier Scientist
Research Centre Jülich GmbH
Jülich Centre for Neutron Science

García Orduña, María Pilar

Técnico Superior del CSIC
Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH)
Universidad de Zaragoza-CSIC

BIBLIOGRAFÍA Y ENLACES RELACIONADOS

Bibliografía

William Clegg, Crystal Structure Determination, Ed. Oxford University Press, Oxford, 1998. (Oxford Chemistry Primers).

George H. Stout and Lyle H. Jensen, X-Ray Structure Determination, A practical Guide, Ed. John Wiley & Sons, New York, 1989 (2ª edición).

C. Giacovazzo et al, Fundamentals of Crystallography, Ed. Oxford Science Publications (IUCr), Oxford, 1992 (1ª edición). 2002 (2ª edición).

C. Giacovazzo Direct phasing in crystallography. IUCr Monographs on Crystallography No. 8. Oxford: IUCr/Oxford Science Publications, 1999. Pp.xxiii + 767.

Jenny P. Glusker, Mitchell Lewis and Miriam Rossi, Crystal Structure Analysis for Chemists and Biologists, Ed.VCH, New York, 1994.

M.F.C. Ladd and R.A. Palmer, Structure Determination by X-Ray Crystallography, Ed. Plenum Press, New York, 1994. (3ª edición).

H.-B. Bürgi and J.D. Dunitz, Structure Correlation (Volumen 1 and 2), VCH, Weinheim, 1994.

D.E. Sands, Vectors and Tensors in Crystallography, Addison-Wesley Publishing, Reading (Massachussetts), 1982.

Coppens, X-Ray Charge Densities and Chemical Bonding, Oxford University Press, Oxford, 1997.