

Prácticas de laboratorio de cristalografía en grandes instalaciones 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. Todas estos hechos se harán constar en la documentación impresa y on-line del Máster y se comunicarán personalmente a los alumnos matriculados.

El objetivo de la asignatura de **prácticas de laboratorio de cristalografía en grandes instalaciones** es proveer un período de prácticas en una línea de radiación sincrotrón para que los estudiantes adquieran experiencia y puedan poner en práctica los conocimientos en cristalografía y técnicas de difracción. En concreto, el alumno se incorpora al grupo de trabajo de una línea de luz o neutrones y participa en las tareas propias de equipo de investigadores a cargo de la estación elegida incluyendo todas las actividades que se realizan durante la realización de un experimento de difracción/absorción con radiación sincrotrón o neutrones; preparación del experimento, recogida de datos, y su posterior análisis.

El alumno participa en un experimento de "In-house" de la línea bajo la supervisión de un investigador más avanzado (doctorando o postdoctoral) del laboratorio de acogida. Además, en su estancia estudiará las propiedades ópticas necesarias para la realización del experimento. Operará los diferentes componentes ópticos de la línea tales como monocromador, sistema de rendijas, espejos focalizantes, etc., con el objetivo fundamental de seleccionar la configuración óptica de rayos X o neutrones que garantice el aprovechamiento óptimo de las características excepcionales de la fuente, que han de conservarse para las distintas estaciones experimentales y que respondan a los requerimientos particulares del experimento en cuestión.

En su estancia se prevé que adquiera conocimientos generales sobre el funcionamiento del generador de radiación sincrotrón o el reactor de producción de haces de neutrones en lo referente a la producción y uso de radiación en cristalografía.

Título asignatura

Prácticas de laboratorio de cristalografía en grandes instalaciones II

Código asignatura

101172

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 en grandes instalaciones I y II y específicos a cada uno de los laboratorios:

Contenidos comunes

Acceso a grandes instalaciones científicas, propiedades, producción, óptica y detección de radiaciones usadas en cristalografía, seguridad radiológica en experimentos científicos, diseño y montaje de experimentos complejos.

Contenidos específicos

1) Spline CRG del European Synchrotron Radiation Facility (Grenoble)

- Cristalografía química y de materiales en Spline I.
- Radiación sincrotrón.
- Métodos de difracción de cristal único.
- Difracción de superficies y fotoemisión.
- Dispersión a bajo ángulo.
- Método de Polvo.
- Espectroscopias de absorción de Rayos X.

2) Macromolecular Crystallography beamline, Sincrotrón ALBA (Cerdanyola)

- Cristalografía Macromolecular en XALOC I (ALBA).
- Radiación sincrotrón.
- Métodos de longitud de onda variable, MAD y SAS.
- Métodos de microfocus y defocusing.
- Cryocristalografía.

- Crystalografía "High Throughput".
- Alta energía.

3) Materials Science and Powder Diffraction Beamline, Sincrotrón ALBA (Cerdanyola)

- Ciencia de materiales y difracción de polvo en MSPD I (ALBA).
- Radiación sincrotrón.
- Difracción de polvo a alta resolución.
- Difracción en condiciones extremas (alta presión).

4) Grupo de Difracción del Institute Laue-Langevin (ILL) (Grenoble, Francia)

- Difracción de neutrones (ILL). Uso de neutrones como sondas experimentales en cristalografía.
- Métodos de dispersión elástica e inelástica.
- Recogida de datos estructurales usando neutrones.
- Métodos de difracción de polvo para estudio de cinética química.
- Difracción magnética.
- Estudio de líquidos y amorfos.

COMPETENCIAS

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

- CE2.- Comprender la naturaleza y propiedades del sólido cristalino y las implicaciones de las mismas para diferentes disciplinas
- CE4.- Entender y valorar artículos científico-técnicos de revistas especializadas en cristalografía y cristalización

CE8.- Ser capaz de definir experimentos optimizados de difracción y metodologías 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

CE10.- Ser capaz de utilizar los fundamentos de difracción para idear nuevos montajes experimentales para resolver problemas concretos

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

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.

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 una gran instalación científica: comprensión de los procesos de generación, óptica y detección de las radiaciones usadas en cristalografía.
- Selección de un haz óptimo para un experimento determinado en función de sus propiedades.
- Dispositivos experimentales para difracción.
- Preparación y optimización de experimentos.
- Recogida de datos y análisis preliminar de los mismos.

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

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

Synchrotron Radiation Crystallography. Academic Press, London-San Diego-New York-Boston-Sydney-Tokyo-Toronto 1992. ISBN 0-12-188080-X.

Als-Nielsen J. and McMorrow D. (2001) Elements of Modern X-ray Physics. Wiley.

P. Coppens, D. Cox, E. Vlieg, I. K. Robinson, P. Paufler.

Aslanov L.A., Fetisov G.V. and Howard J.A.K. (1998) Crystallographic Instrumentation. Oxford Univertisy Press.

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. Uxford University Press.

Hammond C. (2001) The Basics of Crystallography and Diffraction. Oxford University Press.

Margaritondo G. () Elements of Synchrotron Light: For Biology, Chemistry, and Medical Research. Oxford University Press.

Wiedemann H. (2002) Synchrotron Radiation. Springer.

Winick E. (2002) Synchrotron Radiation Sources: A Primer (Series on Synchrotron Radiation Techniques and Applications, Vol 1). World Scientific.