



## GUÍA DOCENTE CURSO: 2019-20

**DATOS BÁSICOS DE LA ASIGNATURA**

Asignatura:	Difracción de Rayos X de Polvo y Monocristal		
Código de asignatura:	71101103	Plan:	Máster en Laboratorio Avanzado de Química
Año académico:	2019-20	Ciclo formativo:	Máster Universitario Oficial
Curso de la Titulación:	1	Tipo:	Obligatoria
Duración:	Primer Cuatrimestre		

**DISTRIBUCIÓN HORARIA DE LA ASIGNATURA SEGÚN NORMATIVA**

Créditos:	3
Horas totales de la asignatura:	75
UTILIZACIÓN DE LA PLATAFORMA VIRTUAL:	Apoyo a la docencia

**DATOS DEL PROFESORADO**

Nombre	<b>Romerosa Nievas, Antonio Manuel</b>		
Departamento	Dpto. de Química y Física		
Edificio	Edificio Científico Técnico de Químicas (CITE I) . Planta 1		
Despacho	010		
Teléfono	+34 950 015305	E-mail (institucional)	<a href="mailto:romerosa@ual.es">romerosa@ual.es</a>
Recursos Web personales	<a href="http://cms.ual.es/UAL/personas/persona.htm?id=505748555649555783">http://cms.ual.es/UAL/personas/persona.htm?id=505748555649555783</a>		
Nombre	<b>Cámara Artigas, Ana María</b>		
Departamento	Dpto. de Química y Física		
Edificio	Edificio Científico Técnico de Químicas (CITE I) . Planta 2		
Despacho	140		
Teléfono	+34 950 015623	E-mail (institucional)	<a href="mailto:acamara@ual.es">acamara@ual.es</a>
Recursos Web personales	<a href="http://cms.ual.es/UAL/personas/persona.htm?id=525350555056494987">http://cms.ual.es/UAL/personas/persona.htm?id=525350555056494987</a>		
Nombre	<b>Scalambra , Franco</b>		
Departamento	Dpto. de Química y Física		
Edificio	Edificio Científico Técnico de Químicas (CITE I) . Planta 1		
Despacho	090		
Teléfono	+34 950 015612	E-mail (institucional)	<a href="mailto:fs649@inlumine.ual.es@ual.es">fs649@inlumine.ual.es@ual.es</a>
Recursos Web personales	<a href="http://cms.ual.es/UAL/personas/persona.htm?id=894950485352524882">http://cms.ual.es/UAL/personas/persona.htm?id=894950485352524882</a>		

<b>ELEMENTOS DE INTERÉS PARA EL APRENDIZAJE DE LA ASIGNATURA</b>
<b>Justificación de los contenidos</b>
<p>Mediante este curso se pretende introducir al alumno en un campo fundamental en Química, la determinación estructural mediante difracción de rayos X. A través de ésta técnica se puede tener una imagen precisa y absoluta de la estructura atómica de un sólido cristalino, lo que nos permite determinar sin género de dudas la composición atómica de los mismos. En definitiva, mediante difracción de rayos X obtenemos una imagen completa de los compuestos químicos a nivel microscópico con valores absolutos de distancias y ángulos de enlace, en las tres direcciones del espacio. La difracción de rayos X de monocristal es sin género de dudas la técnica de determinación estructural más potente que se conoce ya que permite obtener la estructura absoluta de un compuesto con un 100 % de certeza. Por lo tanto, conocer esta técnica, sus principios teóricos y su realización práctica es fundamental para cualquier químico independientemente del área en el que se centre su trabajo.</p>
<b>Materia con la que se relaciona en el Plan de Estudios</b>
<p>Laboratorio de rayos X de sistemas no cristalinos.</p> <p>Laboratorio de piedra natural y sus derivados.</p> <p>Purificación y análisis de macromoléculas de interés farmacológica.</p> <p>Trabajo fin de máster.</p>
<b>Conocimientos necesarios para abordar la Asignatura</b>
<p>Conocimientos básicos de cristalografía, química, matemáticas y física obtenidos en las titulaciones de grado con acceso al máster.</p> <p>Los obtenidos en otras asignaturas obligatorias del máster.</p>
<b>Requisitos previos recogidos en la memoria de la Titulación</b>
<p>Los estudiantes deberán estar en posesión de, preferentemente, alguna de las titulaciones detalladas en la memoria del Máster. Dado que el Máster pretende formar profesionales en técnicas avanzadas, la bibliografía y manuales se encuentran disponible principalmente en inglés, como ocurre con la mayoría de las titulaciones a las que se dirige el Máster. Por ello se recomienda a los aspirantes que posean la capacidad de leer y comprender textos científicos y profesionales, así como material audiovisual en inglés. Si bien toda la instrumentación científica que se utilizará en el Máster emplea programas específicos para su funcionamiento, la estructura lógica de trabajo de esos programas es similar a la que se encuentra en los paquetes ofimáticos, adaptada a la tarea propia que realiza cada equipo. Por este motivo, es importante que los interesados en cursar el Máster cuenten con conocimientos de informática, fundamentalmente con un buen nivel de ofimática. Para aquellos estudiantes extranjeros cuyo país de origen no tenga el castellano como lengua oficial, en trámite de admisión, se les exigirá la acreditación de una competencia lingüística en castellano equivalente o superior a un B1 del Marco Europeo de Referencia para las Lenguas. Para la determinar la superación de este de requisito, la comisión académica podrá, excepcionalmente, valorar la concurrencia de otros idiomas, en particular, el nivel inglés acreditable de conformidad con el Marco Europeo de Referencia para las Lenguas.</p>

<b>COMPETENCIAS</b>
<b>Competencias Básicas y Generales</b>
<p><i>Competencias Básicas</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Aplicación de conocimientos</li> </ul>
<p><i>Competencias Generales</i></p> <p>Capacidad de trabajar en equipo</p>
<b>Competencias Transversales de la Universidad de Almería</b>
<b>Competencias Específicas desarrolladas</b>
CE03 - Que los estudiantes conozcan y sepan utilizar las técnicas de difracción de rayos X de polvo y monocristal.
<b>OBJETIVOS/RESULTADOS DEL APRENDIZAJE</b>
<p>Tras el aprendizaje los alumnos deben conocer: los métodos más empleados en difracción de rayos X tanto de polvo como de monocristal. Discriminar, normalizar y analizar adecuadamente los datos obtenidos mediante las técnicas de difracción de rayos X de polvo y monocristal. Utilizar las bases de datos científicas, resúmenes, artículos completos, etc. necesarios para completar su formación sobre el empleo de las técnicas avanzadas de rayos X.</p>

# PLANIFICACIÓN

## Temario

### BLOQUE I

1. Introducción a la interacción de los rayos X con la materia.

2. Simetría en sistemas cristalinos.

3. Difracción de rayos X de polvo: principios básicos; goniómetro y sus características; asignación de los índices de reflexión, determinación de la celdilla elemental, identificación de la composición cristalina; parámetros de calidad y error en difracción de rayos X de polvo; métodos de Rietveld.

4. Difracción de rayos X de monocristal: principios básicos; difractómetro de rayos X de monocristal; determinación de una estructura de rayos X de monocristal: método de Patterson, métodos directos; afinamiento de una estructura de rayos X; parámetros de error y confianza.

PRÁCTICAS: Iniciación a: preparación de muestras y procedimiento para obtener un difractograma de polvo de una sustancia. Cristalización de moléculas pequeñas. Recogida de datos de un monocristal. Programas para determinar la estructura cristalina de una molécula pequeña y algunos ejemplos.

### BLOQUE II

5. Cristalización de proteínas. Metodologías de cristalización de proteínas. Cribado de las condiciones de cristalización. Mejora de los cristales.

6. Determinación de la estructura de proteínas por cristalografía de rayos X. Obtención del patrón de difracción y análisis de la calidad de los datos. Métodos para resolver el problema de la fase: MIR, MAD y MR. Trazado de la cadena polipeptídica y refinamiento de la estructura. Modelo final y validación.

PRÁCTICA 1: Uso básico de los programas empleados en la resolución de estructuras de proteínas.

PRACTICA 2: Uso de bases de datos estructurales de proteínas. Determinación de la calidad de los cristales y datos estructurales.

## Metodología y Actividades Formativas

Metodología: a) Metodología activa. b) Aprendizaje reflexivo. c) Aprendizaje basado en problemas. d) Aprendizaje cooperativo.

Actividades formativa: a) Sesión de evaluación. b) Tareas de laboratorio. c) Trabajo autónomo del alumno. d) Resolución de problemas. e) Seminarios y actividades académicamente dirigidas.

## Actividades de Innovación Docente

Proyectos docentes:

"HACER FÁCIL LA CRISTALOGRAFÍA Y LA DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL POR RAYOS X."

"HERRAMIENTAS INFORMÁTICAS PARA LA DOCENCIA EN BIOTECNOLOGÍA"

## Diversidad Funcional

Aquellos estudiantes con discapacidad o necesidades educativas especiales pueden dirigirse a la Delegación del Rector para la Diversidad Funcional (<http://www.ual.es/discapacidad>) para recibir la orientación o asesoramiento oportunos y facilitar un mejor aprovechamiento de su proceso formativo. De igual forma podrán solicitar la puesta en marcha de las adaptaciones de contenidos, metodología y evaluación necesarias que garanticen la igualdad de oportunidades en su desarrollo académico. El tratamiento de la información sobre este alumnado, en cumplimiento con la LOPD, es de estricta confidencialidad. Los docentes responsables de esta guía aplicaran las adaptaciones aprobadas por la Delegación, tras su notificación al Centro y al coordinador de curso

## PROCEDIMIENTO DE EVALUACIÓN DE LAS COMPETENCIAS

### Criterios e Instrumentos de Evaluación

Para la evaluación cada una de las competencias de esta asignatura se aplicarán los siguientes instrumentos de evaluación, de los que se especifica a continuación la ponderación aplicable:

Observaciones del proceso: 20 % (competencias CB7, CG01 y CE03)

Pruebas, ejercicios y problemas: 60 % (competencias CB7, CG01 y CE03)

Valoración final de informes, trabajos, proyectos, etc: 20 % (competencias CB7, CG01 y CE03)

### Mecanismos de seguimiento

- Alta y acceso al aula virtual
- Entrega de actividades en clase

## BIBLIOGRAFÍA

### Bibliografía recomendada

#### Básica

- BLOSS, F.D.. (1994) - Crystallography and Cristal Chemistry . Mineralogical Society of America. Washington, D.C.. 1994.
- KLEIN, C. & HULBURT, C.S.. Manual de Mineralogía de Dana (4a ed.). Reverte S.A. Barcelona. 1997.
- PUTNIS, A.. Introduction to Mineral Sciences . Cambridge University Press. 1992.
- PHILLIPS, F.C.. Introduccion a la Cristalografía (2a Ed.). Paraninfo. Madrid. 1978.
- Gómez-Moreno, C. y Sancho Sanz, J.. Estructura de proteínas.. Ariel Ciencia. 2004.
- Bernhard, R.. Biomolecular Crystallography: Principles, Practice, and Application to Structural Biology.. New York: Garland Science.. 2010.
- Carmelo Giacobozzo (Autor, Redactor), Hugo Luis Monaco (Autor), Gilberto Artioli (Autor), & 7 más . Fundamentals of Crystallography.. OUP Oxford.. 2011.
- A. M. Glazer. Crystallography: A Very Short Introduction.. Oxford University Press.. 2016.

#### Complementaria

- AMOROS, J.L.. El Cristal. Atlas. Madrid. 1990.
- RODRIGUEZ GALLEGO, M.. La Difraccion de los Rayos X. Alhambra. Madrid. 1982.

#### Otra Bibliografía

### Bibliografía existente en el Sistema de Información de la Biblioteca de la UAL

Puede ver la bibliografía existente en la actualidad en el Sistema de Gestión de Biblioteca consultando en la siguiente dirección:

[https://www.ual.es/bibliografia\\_recomendada71101103](https://www.ual.es/bibliografia_recomendada71101103)

### DIRECCIONES WEB

- <http://http://ccdc.cam.ac.uk/>  
*Base de datos conteniendo estructuras cristalinas de moléculas pequeñas.*
- <http://nanocrystallography.net/>  
*Portal de acceso a recursos cristalográficos.*
- <http://www.icdd.com/>  
*Centro internacional para datos de difracción*
- <http://webmineral.com/help/XRayDiffraction.shtml#.WzqBI359JQQ>  
*Base de datos de difractogramas de minerales*
- <http://www.ba.ic.cnr.it/softwareic/>  
*software para análisis de rayos X de monocristal y de polvo*
- [http://www.iucr.org/resources/other-directories/software?result\\_42405\\_result\\_page=X](http://www.iucr.org/resources/other-directories/software?result_42405_result_page=X)  
*Software crystalográfico*
- <http://www.iucr.org/iucr>  
*Unión internacional de cristalografía*
- <http://www.ebi.ac.uk/thornton-srv/databases/cgi-bin/pdbsum/GetPage.pl?pdbcode=index.html>  
*Bases secundarias de estructuras de proteínas*
- <http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografía/>  
*Página educativa del CSIC sobre cristalografía*
- <http://www.expasy.org/>  
*Base de datos secundaria de información sobre proteínas*
- <http://www.scopus.com/search/form.uri?display=basic>  
*Base de datos bibliográficas*
- <http://clarivate.com/products/web-of-science/>  
*Base de datos bibliográfica, WebSciece*