




GUÍA DOCENTE CURSO: 2018-19

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:	2018-19	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	Romerosa Nievas, Antonio Manuel		
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)	romerosa@ual.es
Recursos Web personales	http://cms.ual.es/UAL/personas/persona.htm?id=505748555649555783		
Nombre	Cámara Artigas, Ana María		
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)	acamara@ual.es
Recursos Web personales	http://cms.ual.es/UAL/personas/persona.htm?id=525350555056494987		

Puede verificar la autenticidad, validez e integridad de este documento en la dirección:
<https://verificarfirma.ual.es/verificarfirma/code/Gai71ax5vAy/AmcPIu78kw==>

Firmado Por	Universidad De Almeria		Fecha	27/09/2018
ID. FIRMA	blade39adm.ual.es	Gai71ax5vAy/AmcPIu78kw==	PÁGINA	1/5
				
Gai71ax5vAy/AmcPIu78kw==				

ELEMENTOS DE INTERÉS PARA EL APRENDIZAJE DE LA ASIGNATURA

Justificación de los contenidos

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.

Materia con la que se relaciona en el Plan de Estudios

Laboratorio de rayos X de sistemas no cristalinos.
Laboratorio de piedra natural y sus derivados.
Purificación y análisis de macromoléculas de interés farmacológica.
Trabajo fin de máster.

Conocimientos necesarios para abordar la Asignatura

Conocimientos básicos de cristalografía, química, matemáticas y física obtenidos en las titulaciones de grado con acceso al máster.
Los obtenidos en otras asignaturas obligatorias del máster.

Requisitos previos recogidos en la memoria de la Titulación

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 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.

COMPETENCIAS

Competencias Generales

Competencias Transversales de la Universidad de Almería

- Trabajo en equipo

Competencias Básicas

- Aplicación de conocimientos

Competencias Específicas desarrolladas

CE03 - Que los estudiantes conozcan y sepan utilizar las técnicas de difracción de rayos X de polvo y monocristal.

OBJETIVOS/RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

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.

Puede verificar la autenticidad, validez e integridad de este documento en la dirección:
<https://verificarfirma.ual.es/verificarfirma/code/Gai71ax5vAy/AmcPIu78kw==>

Firmado Por

Universidad De Almería

Fecha

27/09/2018

ID. FIRMA

blade39adm.ual.es

Gai71ax5vAy/AmcPIu78kw==

PÁGINA

2/5



Gai71ax5vAy/AmcPIu78kw==

PLANIFICACIÓN			
Temario			
BLOQUE I			
<p>1. Introducción a la interacción de los rayos X con la materia.</p> <p>2. Simetría en sistemas cristalinos.</p> <p>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.</p> <p>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.</p> <p>Prácticas: 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.</p>			
BLOQUE II			
<p>5. Cristalización de proteínas. Conceptos teóricos básicos de la cristalización. Nucleación y crecimiento cristalino. Metodologías de cristalización. Búsqueda de las condiciones de cristalización. Mejora de los cristales.</p> <p>6. 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.</p> <p>Prácticas: Cristalización de proteínas.</p>			
Metodología y Actividades Formativas			
<p>Metodología: a) Metodología activa. b) Aprendizaje reflexivo. c) Aprendizaje basado en problemas. d) Aprendizaje cooperativo.</p> <p>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.</p>			
Actividades de Innovación Docente			
<p>Proyectos docentes:</p> <p>"HACER FÁCIL LA CRISTALOGRAFÍA Y LA DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL POR RAYOS X."</p> <p>"HERRAMIENTAS INFORMÁTICAS PARA LA DOCENCIA EN BIOTECNOLOGÍA"</p>			

Puede verificar la autenticidad, validez e integridad de este documento en la dirección:
<https://verificarfirma.ual.es/verificarfirma/code/Gai71ax5vAy/AmcPIu78kw==>

Firmado Por	Universidad De Almeria	Fecha	27/09/2018
ID. FIRMA	blade39adm.ual.es	PÁGINA	3/5



Gai71ax5vAy/AmcPIu78kw==

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: 30 %
- Pruebas, ejercicios y problemas: 60 %
- Valoración final de informes, trabajos, proyectos, etc: 10 %

Mecanismos de seguimiento

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

Puede verificar la autenticidad, validez e integridad de este documento en la dirección:
<https://verificarfirma.ual.es/verificarfirma/code/Gai71ax5vAy/AmcPIu78kw==>

Firmado Por	Universidad De Almeria	Fecha	27/09/2018
ID. FIRMA	blade39adm.ual.es	PÁGINA	4/5
			
Gai71ax5vAy/AmcPIu78kw==			

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.. Introducción 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.. Oxfor 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:

<http://almirez.ual.es/search/e?SEARCH=DIFRACCION DE RAYOS X DE POLVO Y MONOCRISTAL>

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#.WzqBI359jOQ>
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
Software cristalográfico
- <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/Cristalografia/>
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, WebSciencie

Puede verificar la autenticidad, validez e integridad de este documento en la dirección:
<https://verificarfirma.ual.es/verificarfirma/code/Gai71ax5vAy/AmcPIu78kw==>

Firmado Por

Universidad De Almería

Fecha

27/09/2018

ID. FIRMA

blade39adm.ual.es

Gai71ax5vAy/AmcPIu78kw==

PÁGINA

5/5



Gai71ax5vAy/AmcPIu78kw==