

# VIII Escuela de Difracción de Rayos X en Monocristal de Zaragoza

*Residencia Universitaria de Jaca, Jaca (Huesca)*

**17-22 de Junio de 2018**

Cada día más, el desarrollo científico y tecnológico en diversas áreas fundamenta su progreso en el establecimiento de sólidas relaciones estructura/propiedad. Sin ninguna duda, la Cristalografía de rayos X es hoy en día la herramienta más potente para el acceso a la información de índole estructural. La química, la física, la biología o la ciencia de materiales apoyan una buena parte de su progreso en este tipo de información estructural. En este entorno, los estudios realizados a partir de muestras monocristalinas constituyen un alto porcentaje de las experiencias realizadas.

Respondiendo a una fuerte demanda de formación en este campo, se propone el presente curso, cuyo objetivo es crear un marco científico de alto nivel que permita una formación básica con la que estudiantes o investigadores puedan iniciarse en la Cristalografía de rayos X. Además, la escuela pretende ser un lugar de encuentro en el que investigadores con un cierto conocimiento en Cristalografía puedan ampliar su dominio hacia aspectos más complicados. De este modo, el curso está dirigido a licenciados o graduados, estudiantes de Doctorado, personal de Servicios Técnicos o investigadores que desee profundizar en Cristalografía y en la resolución estructural a partir de difracción de rayos X en muestras monocristalinas.

El curso cuenta con la participación de un buen número de excelentes investigadores españoles, con amplia experiencia en docencia en este área, así como con la contribución puntual del Prof. Carmelo Giacovazzo, referente mundial en los métodos de resolución. El curso se estructurará con un mínimo de 30 horas lectivas, con sesiones teóricas y prácticas. Además, la organización del curso quiere facilitar la interacción directa entre profesores y alumnos, de manera que se estimule el intercambio de información y experiencias en sesiones abiertas de discusión.

**En breve se habilitará una página web con toda la información detallada de la VIII Escuela de Difracción de Rayos X en Monocristal de Zaragoza.**

*Aquellas personas potencialmente interesadas pueden enviar un mensaje a [mpgaror@unizar.es](mailto:mpgaror@unizar.es) para recibir el link a la página web tan pronto esté activa (dos/tres semanas aprox.)*



# PROGRAMA (*simplificado tentativo*)

## LUNES, 18 Junio 2018

### Mañana

Sesión 1ª: Martín Martínez-Ripoll (Instituto de Química-Física Rocasolano, CSIC)  
*Cristalografía de rayos X: Pasado, presente y futuro.*

Sesión 2ª: Carmelo Giacovazzo (Istituto de Cristallografia, Bari, Italia)  
*La simetría: El lenguaje del orden- Grupos espaciales y red recíproca*

### Tarde

Sesión 3ª: Fernando J. Lahoz (ISQCH, CSIC- Universidad de Zaragoza)  
*La difracción de rayos X: reflexiones e intensidades.*

## MARTES, 19 Junio 2018

### Mañana

Sesión 1ª: Pilar García Orduña (ISQCH, CSIC- Universidad de Zaragoza)  
*El difractómetro de monocristal. Precauciones y criterios de medida.*

Sesión 2ª: Carmelo Giacovazzo (Istituto de Cristallografia, Bari, Italia)  
*El viejo problema de la fase: Patterson, métodos directos y otras estrategias.*

### Tarde

Sesión 3ª: Fernando J. Lahoz (ISQCH, CSIC- Universidad de Zaragoza)  
*Sesión práctica: Integración y reducción de datos. La verdadera toma de datos.*

## MIÉRCOLES, 20 Junio 2018

### Mañana

Sesión 1ª: Fernando J. Lahoz (ISQCH, CSIC- Universidad de Zaragoza)  
*Presentación y validación de resultados.*

Sesión 2ª: Carmelo Giacovazzo (Istituto de Cristallografia, Bari, Italia)  
*Tratando con estructuras problemáticas.*

### Tarde

Sesión 3ª: Pilar García Orduña (ISQCH, CSIC- Universidad de Zaragoza)  
*Sesión práctica: Resolución y refinamiento de estructuras convencionales (I)*

## JUEVES, 21 Junio 2018

### Mañana

Sesión 1ª: Pilar García Orduña (ISQCH, CSIC- Universidad de Zaragoza)  
*Bases de datos estructurales: tipos, disponibilidad y aplicaciones.*

Sesión 2ª: Duane Choquesillo (Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra, CSIC – Universidad Granada)

*Sesión práctica: resolución y refinamiento de estructuras convencionales (II)*

### Tarde

Sesión 3ª: Duane Choquesillo (Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra, CSIC – Universidad Granada)

*Sesión práctica: resolución y refinamiento de estructuras problemáticas (I)*

## VIERNES, 22 Junio 2018

### Mañana – ‘Hot related topics’: Practicando con los conceptos

#### Sesión 1ª:

- Isabel Usón (Instituto de Biología Molecular de Barcelona, CSIC)  
*Trabajando a baja resolución: Estructura de macromoléculas. Diferencias y similitudes con las moléculas pequeñas*
- Pilar García Orduña (ISQCH, CSIC- Universidad de Zaragoza)  
*Trabajando a alta resolución: Densidades electrónicas. Método y potenciales aplicaciones*

#### Sesión 2ª:

- Especialista por confirmar  
*Sincrotrones y nuevas fuentes de radiación de rayos X*
- Laura Cañadillas (ILL y Centro Universitario de la Defensa, Universidad de Zaragoza).  
*Técnicas neutrónicas para el estudio de la estructura.*

El Programa oficial del curso se cumplimentará con cuatro **Sesiones Abiertas de Discusión**, sesiones relajadas y distendidas en la que todos los profesores podrán resolver cuantas dudas, comentarios o curiosidades planteen los alumnos. Si el tiempo lo permite, se podrán discutir problemas particulares sugeridos por los alumnos.

En función de la formación cristalográfica previa y de la experiencia en los procesos de difracción de los alumnos, **se articularán lecturas, cuestiones y/o ejercicios complementarios** previamente al comienzo del curso.

Las sesiones prácticas incluirán el uso de distintos programas de resolución y refinamiento de estructuras cristalinas, tanto de acceso abierto como privados. Dada la razonable accesibilidad de los ordenadores portátiles, el curso requerirá que **cada participante acuda con su propio ordenador**. Las instrucciones de instalación de los programas serán enviadas con anterioridad al curso.

## GASTOS DE INSCRIPCIÓN

La inscripción en la VIII Escuela de Cristalografía de Rayos X en Monocristal está pendiente de ser fijada en función de las ayudas solicitadas y que deben ser resueltas en un plazo no superior a dos semanas. En cualquier caso, la organización está haciendo un esfuerzo para que la inscripción sea accesible a jóvenes investigadores: la propuesta que esperamos realizar, *incluyendo alojamiento en media pensión, no superará los 450 €*. Obviamente existirá la posibilidad de realizar la inscripción sin alojamiento.

### Alojamiento

La organización ha negociado el alojamiento de estudiantes (y profesores) en la Residencia Universitaria de Jaca en cuyas aulas tendrán lugar las sesiones formativas. Más información acerca de la residencia en la siguiente página web: <https://www.unizar.es/resijaca/html/inicio.php>.

### Becas

La organización tiene previsto otorgar, *al menos 6 becas*, para alumnos de 3<sup>er</sup> ciclo, miembros del Grupo Especializado de Cristalografía y Crecimiento Cristalino (GE3C-RSEQ). Es posible la concesión de becas financiadas por otras instituciones o empresas.

**El número de participantes está fijado a un número máximo de 30 personas.** Aquellas personas interesadas, recomendamos enviar un mensaje cuanto antes a la secretaría del curso, Dra. Pilar García Orduña ([mpgaror@unizar.es](mailto:mpgaror@unizar.es)), para realizar la reserva de plazas.

## CONTACTO – INFORMACION ADICIONAL

Las personas que requieran mayor información, pueden enviar un mensaje al director del curso Prof. Fernando J. Lahoz ([lahoz@unizar.es](mailto:lahoz@unizar.es))

## PATROCINADORES

La VIII Escuela de Cristalografía de Rayos X en Monocristal, por el momento, cuenta ya con el apoyo y soporte de las siguientes instituciones y empresas:

