Guia docente				
Datos Identificativos				2023/24
Asignatura (*)	Cristalografía Avanzada		Código	610G04042
Titulación	Grao en Nanociencia e Nanotecnoloxía			
Descriptores				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Grado	2º cuatrimestre	Cuarto	Optativa	4.5
Idioma	CastellanoGallegoInglés			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	BioloxíaFísica e Ciencias da TerraQuímica			
Coordinador/a	López Vicente, Manuel		Correo electrónico	manuel.lopez.vicente@udc.es
Profesorado	Álvarez López, Vanessa Avecilla Porto, Fernando Francisco Becerra Fernandez, Manuel López Vicente, Manuel Sanchez Andujar, Manuel Vizoso Vázquez, Ángel José		Correo electrónico	vanessa.alvarez.lopez@udc.es fernando.avecilla@udc.es manuel.becerra@udc.es manuel.lopez.vicente@udc.es m.andujar@udc.es a.vizoso@udc.es
Web				
Descripción general	?Cristalografía Avanzada? es una materia de carácter aplicado del segundo cuatrimestre del cuarto curso del Grado en Nanociencia y Nanotecnología, que pertenece al Módulo de Formación Optativa. Esta materia profundiza sobre los contenidos de la de primer curso ?Cristalografía y Simetría? ?de carácter Formación Básica?. Se trata de una materia donde se pretende que el alumnado aprenda a identificar y reconocer los grupos de simetría espaciales, relacionar las propiedades físicas con la simetría de los cristales, determinar y explicar las estructuras cristalinas mediante difracción de rayos X sobre monocristal, y por último, la relación de la cristalografía con otras disciplinas. Este aprendizaje proporcionará conocimientos expertos y destrezas prácticas que son necesarios para la caracterización de los nanomateriales cristalinos y las macromoléculas biológicas.			

Competencias / Resultados del título	
Código	Competencias / Resultados del título
A3	CE3 - Reconocer y analizar problemas físicos, químicos, matemáticos, biológicos en el ámbito de la Nanociencia y Nanotecnología, así como plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo el uso de fuentes bibliográficas.
A5	CE5 - Conocer los rasgos estructurales de los nanomateriales, incluyendo las principales técnicas para su identificación y caracterización
A6	CE6 - Manipular instrumentación y material propios de laboratorios para ensayos físicos, químicos y biológicos en el estudio y análisis de fenómenos en la nanoescala.
A7	CE7 - Interpretar los datos obtenidos mediante medidas experimentales y simulaciones, incluyendo el uso de herramientas informáticas, identificar su significado y relacionarlos con las teorías químicas, físicas o biológicas apropiadas.
A8	CE8 - Aplicar las normas generales de seguridad y funcionamiento de un laboratorio y las normativas específicas para la manipulación de la instrumentación y de los productos y nanomateriales.
B3	CB3 - Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética
B4	CB4 - Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado
B6	CG1 - Aprender a aprender
B7	CG2 - Resolver problemas de forma efectiva.
B8	CG3 - Aplicar un pensamiento crítico, lógico y creativo.
B9	CG4 - Trabajar de forma autónoma con iniciativa.
B10	CG5 - Trabajar de forma colaborativa.

C3	CT3 - Utilizar las herramientas básicas de las tecnologías de la información y las comunicaciones (TIC) necesarias para el ejercicio de su profesión y para el aprendizaje a lo largo de su vida
C7	CT7 - Desarrollar la capacidad de trabajar en equipos interdisciplinares o transdisciplinares, para ofrecer propuestas que contribuyan a un desarrollo sostenible ambiental, económico, político y social.
C8	CT8 - Valorar la importancia que tiene la investigación, la innovación y el desarrollo tecnológico en el avance socioeconómico y cultural de la sociedad
C9	CT9 - Tener la capacidad de gestionar tiempos y recursos: desarrollar planes, priorizar actividades, identificar las críticas, establecer plazos y cumplirlos

Resultados de aprendizaje			
Resultados de aprendizaje	Competencias / Resultados del título		
Identificar y reconocer la simetría y los grupos de simetría espaciales.	A3 A5 A7	B3 B6 B7 B8 B9	C3 C8
Calcular la estructura molecular mediante la difracción de rayos-X sobre cristales.	A3 A5 A6 A7 A8	B3 B4 B6 B7 B8	C3 C7 C8
Reconocer las propiedades físicas y ópticas de los cristales.	A3 A5 A7	B3 B4 B6 B7 B8	C3 C8
Resolver problemas avanzados de cristalografía.	A3 A6 A7 A8	B4 B7 B8 B10	C3 C7 C8 C9

Contenidos	
Tema	Subtema
Tema 1. Simetría espacial, y grupos de simetría espaciales.	Conocer los 230 grupos de simetría espacial. Grupos simórficos y no-simórficos: operaciones de traslación. Cristales quirales y enantiómeros (asociados a estructuras de proteínas y moléculas de ácidos nucleicos). Nomenclatura, Diagramas, y Tablas internacionales. Visualizador de grupos espaciales con software libre.
Tema 2. Propiedades físicas y ópticas de los cristales.	Relación entre simetría y propiedades magnéticas, dieléctricas y actividad óptica.
Tema 3. Estudio de cristales por difracción de rayos-X.	Determinación estructural de macromoléculas biológicas, compuestos orgánicos e inorgánicos mediante cristalografía de Rayos X: Técnicas básicas de cristalización de proteínas y compuestos orgánicos e inorgánicos; Métodos principales para resolver el problema de la fase: reemplazamiento isomorfo múltiple, difracción anómala múltiple y reemplazamiento molecular; Refinamiento y validación de los modelos.

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competencias / Resultados	Horas lectivas (presenciales y virtuales)	Horas trabajo autónomo	Horas totales

Sesión magistral	A3 A5 A6 B3 B6 B8 C3 C7 C8 C9	16.5	39.6	56.1
Prácticas de laboratorio	A3 A6 A8 B4 B7 B9 B10 C3 C9	10	20	30
Taller	A7 B4 B6 B8 B9 B10 C3	7	15.4	22.4
Prueba mixta	A3 A6 B3 B7	2	0	2
Actividades iniciales	B3 C7	1	0	1
Atención personalizada		1	0	1
(*)Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos				

Metodologías	
Metodologías	**Descripción**
Sesión magistral	Clases magistrales presenciales de 50 minutos de duración destinadas a impartir los contenidos teóricos de la asignatura con la ayuda de material audiovisual y recursos online.
Prácticas de laboratorio	Clases prácticas en las que se identificarán los 230 grupos de simetría espacial con software específico, se observará con casos prácticos la relación entre la simetría y las propiedades magnéticas, dieléctricas y de actividades ópticas; se emplearán técnicas de cristalización para cristalizar una macromolécula biológica y se realizará una simulación de determinación de la estructura de una proteína mediante cristalografía de Rayos X. También se cristalizarán compuestos orgánicos e inorgánicos y se determinará su estructura.
Taller	Estas sesiones estarán dedicadas a la resolución de problemas y cuestiones por parte del alumnado, con la orientación del profesorado. Estos problemas se facilitarán secuenciados en el tiempo de acuerdo con los contenidos tratados en las sesiones magistrales. El trabajo se realizará individualmente o en grupos bajo la dirección del profesorado.
Prueba mixta	Esta actividad tendrá como objetivo evaluar los conocimientos adquiridos por el alumno mediante una prueba escrita.
Actividades iniciales	Sesión introductoria a desarrollar el primer día de clase, en la que se explicará el programa de la asignatura, la metodología, los criterios de evaluación, así como un calendario de cada una de las actividades previstas.

Atención personalizada	
Metodologías	**Descripción**
Taller Sesión magistral Prácticas de laboratorio Actividades iniciales	La atención personalizada se realizará mediante tutorías y entrevistas personales en fechas señaladas. Además, esta atención personalizada podrá llevarse a cabo también de forma telemática, a través del correo electrónico, del campus virtual, y de la plataforma Microsoft Teams. Se prestará especial atención a aquellos alumnos que por sus características especiales puedan tener mayores problemas de aprendizaje y a aquellos con dedicación a tiempo parcial.

Evaluación			
Metodologías	**Competencias / Resultados**	**Descripción**	**Calificación**
Taller	A7 B4 B6 B8 B9 B10 C3	Se calificarán tanto las respuestas del alumnado como su participación individual o en grupo en las actividades presenciales correspondientes. Ocasionalmente, y a solicitud del profesor, el alumnado debe presentar boletines de problemas que también pueden ser evaluados.	15
Prácticas de laboratorio	A3 A6 A8 B4 B7 B9 B10 C3 C9	Se evaluarán los siguientes aspectos del trabajo en el laboratorio: - Organización del trabajo y seguridad. - Actitud, curiosidad científica y grado de implicación en el trabajo. - Calidad en la interpretación de los resultados. - Calidad del informe final (cuaderno de laboratorio).	30

Prueba mixta	A3 A6 B3 B7	Consistirá en una prueba sobre contenidos teóricos. Constará tanto de preguntas de desarrollo como de preguntas tipo test y problemas que serán similares a los presentados a lo largo del curso. La calificación mínima requerida para superar esta prueba es de 5 puntos sobre 10.	55

Observaciones evaluación

La asignatura estará dividida en tres partes: una centrada en el estudio de la simetría espacial y los grupos de simetría espaciales, otra abordará las propiedades físicas y ópticas de los cristales, y la tercera acerca del estudio de cristales por difracción de rayos-X. Cada una de estas partes tendrá asignada en la calificación final un tercio del porcentaje de cada actividad mencionada.

Para superar la materia es requisito imprescindible obtener una calificación mínima de 5 puntos sobre un máximo de 10 en el cómputo total. En caso de la ?Prueba mixta?, la calificación mínima será de 5 sobre 10, y en los casos de ?Prácticas de laboratorio? y ?Taller?, será de 4,6 sobre 10. Estos baremos se mantienen para cada una de las tres partes en las que se divide la asignatura. En caso contrario, la asignatura no será superada. En caso de que la calificación media entre todas las actividades sea mayor que 5, pero no se haya superado alguna de las actividades evaluables con las notas previamente indicadas, la nota que aparecerá en el acta será de 4. Una vez superadas todas las actividades, la nota final se calculará de la siguiente forma: la ?Prueba mixta? supondrá un 55% de la nota final, las ?Prácticas de laboratorio? supondrán el 30% de la calificación final, y la resolución de problemas de ?Taller? contribuirá con el 15% restante. La asistencia a clases de taller y prácticas de laboratorio, y la entrega de problemas son obligatorias para ser evaluados. La ausencia no justificada a una de las sesiones de laboratorio, o a una actividad de grupo reducido supondrá la descalificación de la asignatura. El alumno será declarado NO PRESENTADO solamente si no asiste a ninguna de las actividades cuya evaluación supone más del 10% de la calificación final.

Las Matrículas de Honor serán otorgadas solamente a los estudiantes que hayan sido evaluados durante el curso y hayan superado la correspondiente evaluación en cualquiera de las dos oportunidades, hasta alcanzar el máximo de Matrículas de Honor posible según la normativa de la institución.

En las convocatorias de junio (primera oportunidad) y julio (segunda oportunidad) se evaluará del mismo modo (porcentajes). Los alumnos con reconocimiento de dedicación a tiempo parcial no tendrán la obligación de asistir a las clases teóricas ni a las actividades en grupos reducidos, aunque su asistencia a prácticas sí será obligatoria. El porcentaje de la calificación correspondiente a las actividades de grupo reducido será asimilado a la calificación de la prueba mixta tanto en la primera como en la segunda oportunidad.

Durante la realización de la prueba, en cualquiera de ambas oportunidades, excepto que se indique lo contrario, está prohibido el uso de cualquier dispositivo con acceso a Internet. Si durante la realización de la prueba práctica, hubiera indicio del uso no autorizado de esos dispositivos, él/a estudiante será expulsado del aula, y se procederá según la Ley 3/2022, de 24 de febrero, de convivencia universitaria y el reglamento disciplinar del estudiantado de la UDC. La realización fraudulenta de las pruebas o actividades de evaluación, una vez comprobada, implicará directamente la calificación de

suspenso en la convocatoria en que se cometa: el/la estudiante será calificado con ?suspenso? (nota numérica 0) en la convocatoria correspondiente del curso académico, tanto si la comisión de la falta se produce en la primera oportunidad como en la segunda. Para esto, se procederá a modificar su calificación en el acta de primera oportunidad, si fuese necesario.

En la convocatoria extraordinaria de diciembre, se aplicarán los criterios de evaluación de la guía docente del curso 2022-23.

Fuentes de información	
Básica	- Sands, Donald E. (1974). Introducción a la cristalografía. Barcelona, Reverté.- Kettle, Sidney F.A. (2007). Symmetry and structure readable group theory for chemists. Hoboken: John Wiley.- Borchardt-Ott, Walter (2011). Crystallography : an introduction . Berlin, Springer.- Dept. de Cristalografía y Biol. Estruc. , CSIC (2020). Crystalografía.- Hargittai, István (1995). Symmetry through the eyes of a chemist. New York : Plenum Press.- Hammond, C (2009). The Basics of crystallography and diffraction. Oxford University Press.- Klein, C; Hurlbut, C.S. Jr. (1996-1997). Manual de mineralogía basado en la obra de J.D. Dana. Vol. 1.. Barcelona, Reverté.- Bloss, F.D. (1994). Crystallography and crystal chemistry: an introduction. Washington, Mineralogical Society of America.- Tilley, Richard J.D. (2020). Crystals and Crystal Structures, 2nd Edition. Editorial Willey. ISBN: 978-1-119-54859-1.- Bergfors. T.M. (2022). Protein Crystallization, 3th Edition. International University Line. - Rodes, G. (2010). Crystallography Made Crystal Clear: A Guide for Users of Macromolecular Models. 3th Edition. Academic Press.
Complementária	- Müller, Ulrich (2013). Relaciones de simetría entre estructuras cristalinas : aplicaciones de la teoría de grupos cristalográficos en cristaloquímica. Madrid- DAVID J. WILLOCK (2009). Molecular Symmetry. Willey- Giacovazzo, C (2011). Fundamentals of crystallography. Oxford ; New York : Oxford University Press- Amorós, J.L. (1990). El Cristal : morfología, estructura y propiedades físicas. Madrid, Ed. Atlas- Nesse, W.D. (2009). Introduction to optical mineralogy. New York : Oxford University Press- Amigo, J.M. et al. (1981). Cristalografía. Madrid, Rueda.

Recomendaciones
Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente
Cristalografía y Simetría/610G04006
Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente
Asignaturas que continúan el temario
Otros comentarios
Programa de la Facultad de Ciencias 'Green Campus'Para contribuir a lograr un entorno sostenible inmediato y cumplir con el punto 6 de la ?Declaración Ambiental de la Facultad de Ciencias (2020)?, los trabajos documentales realizados en esta materia:a) Se solicitarán mayoritariamente en formato virtual y soporte informático.b) De realizarse en papel:- No se utilizarán plásticos.- Se realizarán impresiones a doble cara.- Se utilizará papel reciclado.- Se evitarán borradores.Incorporación de la perspectiva de género- Según se recoge en las distintas normativas de aplicación para la docencia universitaria se deberá incorporar la perspectiva de género en esta materia (se usará lenguaje no sexista, se utilizará bibliografía de autores/as de ambos sexos, se propiciará la intervención en clase de alumnos y alumnas...).- Se trabajará para identificar y modificar prejuicios y actitudes sexistas y se influirá en el entorno para modificarlos y fomentar valores de respeto e igualdad.- Se deberán detectar situaciones de discriminación por razón de género y se propondrán acciones y medidas para corregirlas.

(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías