



Guía Docente				
Datos Identificativos			2023/24	
Asignatura (*)	Cristalografía Avanzada	Código	610G04042	
Titulación	Grao en Nanociencia e Nanotecnoloxía			
Descriptorios				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Grao	2º cuatrimestre	Cuarto	Optativa	4.5
Idioma	CastelánGalegoInglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	BioloXíaFísica e Ciencias da TerraQuímica			
Coordinación	López Vicente, Manuel	Correo electrónico	manuel.lopez.vicente@udc.es	
Profesorado	Álvarez López, Vanessa	Correo electrónico	vanessa.alvarez.lopez@udc.es	
	Avecilla Porto, Fernando Francisco		fernando.avecilla@udc.es	
	Becerra Fernandez, Manuel		manuel.becerra@udc.es	
	López Vicente, Manuel		manuel.lopez.vicente@udc.es	
	Sanchez Andujar, Manuel		m.andujar@udc.es	
	Vizoso Vázquez, Ángel José		a.vizoso@udc.es	
Web				
Descrición xeral	?Cristalografía Avanzada? é unha materia de carácter aplicado do segundo cuatrimestre do cuarto curso do Grao en Nanociencia e Nanotecnoloxía, que pertence ao Módulo de Formación Optativa. Esta materia profunda sobre os contidos da de primeiro curso ?Cristalografía e Simetría? ?de carácter Formación Básica?. Trátase dunha materia onde se pretende que o alumnado aprenda a identificar e recoñecer os grupos de simetría espaciais, relacionar as propiedades físicas coa simetría dos cristais, determinar e explicar as estruturas cristalinas mediante difracción de raios X sobre monocristal, e por último, a relación da cristalografía con outras disciplinas. Esta aprendizaxe proporcionará coñecementos expertos e destrezas prácticas que son necesarios para a caracterización dos nanomateriais cristalinos e as macromoléculas biolóxicas.			

Competencias do título	
Código	Competencias do 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 da aprendizaxe				
Resultados de aprendizaxe			Competencias do título	
Identificar e recoñecer a simetría e os grupos de simetría espaciais.			A3	B3
			A5	B6
			A7	B7
				B8
				B9
Calcular a estrutura molecular mediante a difracción de raios-X sobre cristais.			A3	B3
			A5	B4
			A6	B6
			A7	B7
			A8	B8
Recoñecer as propiedades físicas e ópticas dos cristais.			A3	B3
			A5	B4
			A7	B6
				B7
				B8
Resolver problemas avanzados de cristalografía.			A3	B4
			A6	B7
			A7	B8
			A8	B8
				B10

Contidos	
Temas	Subtemas
Tema 1. Simetría espacial, e grupos de simetría espaciais.	Coñecer os 230 grupos de simetría espacial. Grupos simórficos e non-simórficos: operacións de translación. Cristais quirais e enantiómeros (asociados a estruturas de proteínas e moléculas de ácidos nucleicos). Nomenclatura, Diagramas, e Táboas internacionais. Visualizador de grupos espaciais con software libre.
Tema 2. Propiedades físicas e ópticas dos cristais.	Relación entre simetría e propiedades magnéticas, dieléctricas e actividade óptica.
Tema 3. Estudo de cristais por difracción de raios-X.	Determinación estrutural de macromoléculas biolóxicas, compostos orgánicos e inorgánicos mediante cristalografía de Raios X: Técnicas básicas de cristalización de proteínas e de compostos orgánicos e inorgánicos; Métodos principais para resolver o problema da fase: reemplazamiento isomorfo múltiple, difracción anómala múltiple e reemplazamiento molecular; Refinamento e validación dos modelos.

Planificación				
Metodoloxías / probas	Competencias	Horas presenciais	Horas non presenciais / traballo autónomo	Horas totais



Sesión maxistral	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
Obradoiro	A7 B4 B6 B8 B9 B10 C3	7	15.4	22.4
Proba mixta	A3 A6 B3 B7	2	0	2
Actividades iniciais	B3 C7	1	0	1
Atención personalizada		1	0	1
*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado				

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Sesión maxistral	Clases maxistras presenciais de 50 minutos de duración destinadas a impartir os contidos teóricos da materia coa axuda de material audiovisual e recursos en liña.
Prácticas de laboratorio	Clases prácticas nas que se identificarán os 230 grupos de simetría espacial con software específico, observarase con casos prácticos a relación entre a simetría e as propiedades magnéticas, dieléctricas e de actividades ópticas; empregáranse técnicas de cristalización para cristalizar unha macromolécula biolóxica e realizarase unha simulación de determinación da estrutura dunha proteína mediante cristalografía de Raios X. Tamén se cristalizarán compostos orgánicos e inorgánicos e se determinará súa estrutura.
Obradoiro	Estas sesións estarán dedicadas á resolución de problemas e cuestións por parte do alumnado, coa orientación do profesorado. Estes problemas facilitarase secuenciados no tempo #de acordo con os contidos tratados nas sesións maxistras. O traballo realizarase individualmente ou en grupos baixo a dirección do profesorado.
Proba mixta	Esta actividade terá como obxectivo avaliar os coñecementos adquiridos por el alumno mediante unha proba escrita.
Actividades iniciais	Sesión introdutoria a desenvolver o primeiro día de clase, na que se explicará o programa da materia, a metodoloxía, os criterios de avaliación, así como un calendario de cada unha das actividades previstas.

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Obradoiro Sesión maxistral Prácticas de laboratorio Actividades iniciais	A atención personalizada realizarase mediante tutorías e entrevistas persoais en datas sinaladas. Ademais, esta atención personalizada poderá levar a cabo tamén de forma telemática, a través do correo electrónico, do campus virtual, e da plataforma Microsoft Teams. Prestarase especial atención a aqueles alumnos que polas súas características especiais poidan ter maiores problemas de aprendizaxe e a aqueles con dedicación a tempo parcial.

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias	Descrición	Cualificación
Obradoiro	A7 B4 B6 B8 B9 B10 C3	Cualificaranse tanto as respostas do alumnado como a súa participación individual ou en grupo nas actividades presenciais correspondentes. Ocasionalmente, e a solicitude do profesor, o alumnado debe presentar boletíns de problemas que tamén poden ser avaliados.	15
Prácticas de laboratorio	A3 A6 A8 B4 B7 B9 B10 C3 C9	Avaliaranse os seguintes aspectos do traballo no laboratorio: - Organización do traballo e seguridade. - Actitude, curiosidade científica e grao de implicación no traballo. - Calidade na interpretación dos resultados. - Calidade do informe final (caderno de laboratorio).	30
Proba mixta	A3 A6 B3 B7	Consistirá nunha proba sobre contidos teóricos. Constará tanto de preguntas de desenvolvemento como de preguntas tipo test e problemas que serán similares aos presentados ao longo do curso. A cualificación mínima requirida para superar esta proba é de 5 puntos sobre 10.	55



Observacións avaliación

A materia estará dividida en tres partes: unha centrada no estudo da simetría espacial e os grupos de simetría espaciais, outra abordará as propiedades físicas e ópticas dos cristais, e a terceira achega do estudo de cristais por difracción de raios-X. Cada unha destas partes terá asignada na cualificación final un terzo da porcentaxe de cada actividade mencionada.

Para superar a materia é requisito imprescindible obter unha cualificación mínima de 5 puntos sobre un máximo de 10 no cómputo total. En caso da ?Proba mixta?, a cualificación mínima será de 5 sobre 10, e nos casos de ?Prácticas de laboratorio? e ?Taller?, será de 4,6 sobre 10. Estes baremos mantéñense para cada unha das tres partes nas que se divide a materia. En caso contrario, a materia non será superada. No caso de que a cualificación media entre todas as actividades sexa maior que 5, pero non se superou algunha das actividades avaliadas coas notas previamente indicadas, a nota que aparecerá na acta será de 4. Unha vez superadas todas as actividades, a nota final calcularase da seguinte forma: a ?Proba mixta? supoñerá un 55% da nota final, as ?Prácticas de laboratorio? supoñerán o 30% da cualificación final, e a resolución de problemas de ?Taller? contribuirá co 15% restante. A asistencia a clases de taller e prácticas de laboratorio, e a entrega de problemas son obrigatorias para ser avaliados. A ausencia non xustificada a unha das sesións de laboratorio, ou a unha actividade de grupo reducido supoñerá a descualificación da materia. O alumno será declarado NON PRESENTADO soamente se non asiste a ningunha das actividades cuxa avaliación supón máis do 10% da cualificación final.

As Matrículas de Honra serán outorgadas soamente aos estudantes que fosen avaliados durante o curso e superasen a correspondente avaliación en calquera das dúas oportunidades, ata alcanzar o máximo de Matrículas de Honra posible segundo a normativa da institución.

Nas convocatorias de xuño (primeira oportunidade) e xullo (segunda oportunidade) avaliarase do mesmo xeito (porcentaxes). Os alumnos con recoñecemento de dedicación a tempo parcial non terán a obrigación de asistir ás clases teóricas nin ás actividades en grupos reducidos, aínda que a súa asistencia a prácticas si será obrigatoria. A porcentaxe da cualificación correspondente ás actividades de grupo reducido será asimilado á cualificación da proba mixta tanto na primeira como na segunda oportunidade.

Durante a realización da proba, en calquera de ambas as oportunidades, agás que se indique o contrario, está prohibido o uso de calquera dispositivo con acceso a Internet. Se durante a realización da proba práctica, houbese indicio do uso non autorizado deses dispositivos, el/a estudante será expulsado da aula, e procederase segundo a Lei 3/2022, do 24 de febreiro, de convivencia universitaria e o regulamento disciplinar do estudantado da UDC. A realización fraudulenta das probas ou actividades de avaliación, unha vez comprobada, implicará directamente a cualificación de suspenso na convocatoria en que se cometa: o/a estudante será cualificado con ?suspenso? (nota numérica 0) na convocatoria correspondente do curso académico, tanto se a comisión da falta prodúcese na primeira oportunidade como na segunda. Para isto, procederase a modificar a súa cualificación na acta de primeira oportunidade, se fose necesario.

Na convocatoria extraordinaria de decembro, aplicaranse os criterios de avaliación da guía docente do curso 2022-23.

Fontes de información

Bibliografía 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). Crystallografía.- 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 Wiley. 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.
Bibliografía complementaria	- Müller, Ulrich (2013). Relaciones de simetría entre estructuras cristalinas : aplicaciones de la teoría de grupos cristalográficos en cristalografía. Madrid- DAVID J. WILLOCK (2009). Molecular Symmetry. Wiley- Giacomazzo, 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.

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

Cristalografía e Simetría/610G04006



Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Materias que continúan o temario

Observacións

Programa da Facultade de Ciencias 'Green Campus' Para contribuír a lograr unha contorna sostible inmediata e cumprir co punto 6 da ?Declaración Ambiental da Facultade de Ciencias (2020)?, os traballos documentais realizados nesta materia: a) Solicitaranse maioritariamente en formato virtual e soporte informático. b) De realizarse en papel: - Non se utilizarán plásticos. - Realizaranse impresións a dobre cara. - Utilizarase papel reciclado. - Evitaranse borradores. Incorporación da perspectiva de xénero - Segundo recóllese nas distintas normativas de aplicación para a docencia universitaria deberase incorporar a perspectiva de xénero nesta materia (usarase linguaxe non sexista, utilizarase bibliografía de autores/as de ambos os sexos, propiciarse a intervención en clase de alumnos e alumnas...). - Traballarase para identificar e modificar prexuizos e actitudes sexistas e influirase na contorna para modificalos e fomentar valores de respecto e igualdade. - Deberanse detectar situacións de discriminación por razón de xénero e propoñeranse accións e medidas para corrixilas.

(*)A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías