

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. Así ha quedado reconocido por la ONU, que ha designado 2014 como Año Internacional de la Cristalografía (IYCr 2014). 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, la escuela de Cristalografía de Zaragoza retoma su trayectoria, tras un periodo de ausencia. En esta edición, se vuelve a su formato inicial de 5 días en los que 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 complejos.

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 las contribuciones puntuales de representantes del mundo industrial relacionado con este tipo de estudios. El curso se estructurará con un mínimo de 32 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 4 sesiones abiertas de discusión. La escuela tendrá lugar en la Facultad de Ciencias de la Universidad de Zaragoza, del 8 al 12 de septiembre próximo.

Tratando de hacer más personalizada la formación ofertada en los aspectos prácticos, la organización limita el número de participantes a un **máximo de 30 alumnos**. La cuota de inscripción es de 260 euros, incluyendo la participación en las sesiones teóricas y prácticas del curso, la documentación del mismo y los almuerzos de lunes a viernes.

Está prevista la dotación de un pequeño número de becas para alumnos de 3^{er} ciclo y para miembros del GE3C. Aquellos alumnos interesados en solicitar una ayuda para la participación en el curso (que cubriría su alojamiento en la residencia universitaria) deben solicitarlo, a la vez que realizan su inscripción, acompañando un breve CV y una carta de su director de tesis.

Se ha negociado el alojamiento de los alumnos (y también de profesores) en el Colegio Mayor Pedro Cerbuna (a 50 metros de la Facultad de Ciencias), al precio de 27 euros/noche, alojamiento y desayuno (**reserva y pago necesariamente a través de la organización de la Escuela**). Información acerca del alojamiento en <http://www.unizar.es/cerbuna>.

Si alguien estuviera interesado en otro tipo de alojamiento, la organización podría realizar la reserva en hoteles próximos a la facultad a precios especiales para la Universidad de Zaragoza.

Las personas interesadas deben ponerse en contacto por **correo electrónico** con passarel@unizar.es y recibirán más información así como el boletín de inscripción. La celebración del curso queda supeditada a una asistencia mínima de 15 alumnos.

Para cualquier tipo de duda, o solicitar **más información**, contactar con:

Prof. Fernando J. Lahoz Dr. Pilar García-Orduña
Tfno.: 976 761147 976 762289
E-mail: lahoz@unizar.es mpgaror@unizar.es

<http://www.isqch.unizar-csic.es/>

VII Escuela de CRISTALOGRAFIA de Rayos X en Monocristal

Zaragoza

8 al 12 de septiembre de 2014

Fac. de Ciencias – Universidad Zaragoza

Directores

Prof. Fernando J. Lahoz

Dr. Pilar García Orduña

Secretario

Dr. Vincenzo Passarelli



Programa provisional

Lunes, 8

9:30. Fernando J. Lahoz (30 min)

Apertura del curso - 'Breaking the ice'

10:00 Santiago García-Granda (1 h)

Cristalografía de rayos X : Pasado, presente y futuro.

11:30. Joan Francesc Piniella (2 h)

La Simetría: el lenguaje del orden - Grupos espaciales y red recíproca

15:30 Martín Martínez-Ripoll (2 h)

La difracción de rayos X: reflexiones e intensidades.

17:30 Pilar García Orduña (1h30)

Rayos X y otras radiaciones alternativas

19:00 S. García-Granda, J.F. Piniella, M. Martínez-Ripoll.

Sesión abierta de discusión

Martes, 9

9:00 Pilar Gómez Sal (2 h)

El difractómetro de monocristal. Precauciones y criterios de medida.

11:30 Santiago García-Granda (2 h.)

El viejo problema de la fase: Patterson, métodos directos y otras estrategias.

15:30 Fernando J. Lahoz (1h30)

Sesión práctica: Integración y reducción de datos. Correcciones necesarias.

17:00 Joan Francesc Piniella (1h30)

SIR. Completando el modelo estructural.

18:30 P. Gómez Sal, J.F. Piniella, F. J. Lahoz

Sesión abierta de discusión

Miércoles, 10

9:00 Fernando J. Lahoz (1h)

Presentación y validación de resultados.

10:00 Pilar Gómez Sal (1h)

Tratando con estructuras problemáticas.

11:30 Pilar García Orduña (2h)

Sesión práctica: Resolución y refino de estructuras convencionales (I)

Tarde: Libre - visita a una empresa química.

Jueves, 11

9:00 Martín Martínez-Ripoll (1h)

Bases de datos estructurales: tipos, disponibilidad y aplicaciones.

10:00 Pendiente de confirmación (1h00)

Avances en hardware y software para difracción de rayos X.

11:30 Jorge Pasán (2 h)

Sesión práctica: resolución y refino de estructuras convencionales (II)

15:30 Martín Martínez-Ripoll (1h30)

Sesión práctica-Bases de datos estructurales.

17h30 Pilar Gómez Sal (1h30)

Sesión práctica: resolución y refino de estructuras problemáticas (I)

19:00 M. Martínez-Ripoll, P. Gómez Sal, J. Pasán

Sesión abierta de discusión

Viernes, 12

9:00 Martín Martínez-Ripoll (1h)

Estructura de macromoléculas. Diferencias y similitudes con las moléculas pequeñas

10:00 Pilar García Orduña (1h)

Densidades electrónicas: método y potenciales aplicaciones

11:30 Fernando J. Lahoz (1h)

El tratamiento de la quiralidad en el análisis estructural

12:30 Jorge Pasán (1 h)

Interacciones débiles

15:30 Pilar García Orduña (1h30)

Sesión práctica: resolución y refino de estructuras problemáticas (II)

17h30 Joan Francesc Piniella (1h30)

Sesión práctica: programas alternativos resolución y refino de estructuras problemáticas (II)

19:00 F. J. Lahoz, P. García Orduña

Evaluación y clausura

Las sesiones abiertas de discusión se plantean como foros informales y relajados de discusión donde se resuelvan dudas y problemas, o se aclaren curiosidades particulares en un contacto directo entre los alumnos y profesores.

Profesorado

Santiago García Granda
Universidad de Oviedo

Pilar García Orduña
ISQCH (C.S.I.C. - Univ. Zaragoza)

Pilar Gómez Sal
Universidad de Alcalá de Henares

Fernando J. Lahoz Díaz
ISQCH (C.S.I.C. - Univ. Zaragoza)

Martín Martínez-Ripoll
Instituto de Química Física Rocasolano, C.S.I.C.

Jorge Pasán García
Universidad de La Laguna

Joan Francesc Piniella
Universitat Autònoma de Barcelona