

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 articula el presente curso, con el objetivo de 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 difíciles.

De este modo, el curso está dirigido a graduados, estudiantes de doctorado o personal de servicios técnicos que deseen profundizar en sus conocimientos de Cristalografía de Rayos X y en la resolución estructural a partir de experimentos de difracción de rayos X en monocristal.

El curso cuenta con la participación de un buen número de excelentes investigadores españoles, con amplia experiencia en docencia en este área. El curso se estructurará 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.

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**, que deben acudir con su

ordenador portátil. La realización del curso requiere un mínimo de participantes. En caso de no alcanzar dicho mínimo se comunicará a las personas interesadas su anulación, antes del 15 de agosto.

La Escuela tendrá lugar en la Residencia Universitaria de Jaca, del 9 al 13 de septiembre próximo, donde también se ha negociado el alojamiento de los alumnos y profesores.

La **cuota de inscripción a la escuela**, que incluye la participación en las sesiones teóricas y prácticas del mismo, la documentación del mismo, desayunos, almuerzos, y **alojamiento** de domingo a viernes es de **450 o 400 euros** (con alojamiento en habitación individual, o doble de uso compartido, respectivamente).

En el caso de no desear alojamiento en la Residencia Universitaria de Jaca la cuota de inscripción (que incluye comida) es de 300 euros.

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 inscripción) deben solicitarlo, a la vez que realizan su inscripción, acompañando un breve CV y una carta de su director de tesis.

El boletín de inscripción deberá remitirse **antes del 31 de julio**, por **correo electrónico**, a la dirección: mpgaror@unizar.es

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/>

IX Escuela de CRISTALOGRAFIA de Rayos X en Monocristal

**Residencia Universitaria Jaca
Jaca (Huesca)
9 al 13 de septiembre de 2019**

Directores

Prof. Fernando J. Lahoz

*Profesor de Investigación del CSIC y Director
del Instituto de Síntesis Química y Catálisis
Homogénea - ISQCH (CSIC – Univ. Zaragoza)*

Dr. Pilar García Orduña

*Titulado Superior responsable del Servicio de
Difracción de Rayos X del Centro de Química y
Materiales de Aragón (CSIC – Univ. Zaragoza)*

Programa provisional

Lunes, 9 de septiembre

9:00. *Fernando J. Lahoz*

Apertura del curso – ‘Breaking the ice’

09:30 *Fernando J. Lahoz*

Cristalografía de rayos X : Pasado, presente y futuro.

11:30. *Begoña Bazán*

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

15:30 *Fernando J. Lahoz*

La difracción de rayos X: reflexiones e intensidades.

17:30 *Pilar García Orduña*

El difractor de monocristal. Precauciones y criterios de medida.

19:00 *Fernando J. Lahoz, Begoña Bazán, Pilar García Orduña.*

Sesión abierta de discusión

Martes, 10 de septiembre

9:00 *Fernando J. Lahoz*

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

11:30 *Jordi Benet*

Cristalización.

15:30 *Pilar García Orduña*

Sesión práctica: Integración y reducción de datos.

17:30 *Duane Choquesillo Lazarte*

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

19:30 *Fernando Lahoz, Jordi Benet, Duane Choquesillo*

Sesión abierta de discusión

Miércoles, 11 de septiembre

9:00 *Jordi Benet*

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

11:30 *Fernando J. Lahoz*

Presentación y validación de resultados.

Tarde: Libre.

Jueves, 12 de septiembre

9:00 *Pilar García Orduña*

Bases de datos estructurales: tipos, disponibilidad y aplicaciones.

11:30 *Duane Choquesillo Lazarte*

Sesión práctica: Resolución y refinamiento de estructuras convencionales (II)

15:30 *Laura Cañadillas Delgado*

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

17h30 *Duane Choquesillo Lazarte*

Sesión práctica: Resolución y refinamiento de estructuras convencionales (III)

19:30 *P. García Orduña, Duane Choquesillo, Laura Cañadillas*

Sesión abierta de discusión

Viernes, 13 de septiembre

9:00 *Armando Albert*

Estructura de macromoléculas. Diferencias y similitudes con las moléculas pequeñas

10:00 *Pilar García Orduña*

Densidades electrónicas: método y potenciales aplicaciones

11:30 Pendiente de confirmación

Difracción de electrones

12:30 *Laura Cañadillas*

Técnicas neutrónicas para el estudio de la estructura

13:30 *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

Armando Albert de la Cruz

Instituto de Química-Física Rocasolano, C.S.I.C.

Begoña Bazán Blau

Universidad del País Vasco

Jordi Benet-Buchholz

Instituto Catalán de Investigación Química

Laura Cañadillas Delgado

Institut Laue Langevin, Grenoble

Duane Choquesillo Lazarte

LEC, IACT (C.S.I.C.- Univ. Granada)

Pilar García Orduña

ISQCH (C.S.I.C. – Univ. Zaragoza)

Fernando J. Lahoz Díaz

ISQCH (C.S.I.C. – Univ. Zaragoza)