



SGIker Prestakuntza Eskaintza (Ikerkuntzarako Zerbitzu Orokorrak)

Ikastaroaren izenburua:

Kristalbakarreko difrakzioko datuak murrizteko tailerra, bereizmena eta egiturak Olex2 bidez fintzea.

Data	2025eko irailaren 15etik 17ra.
Orduetgia	09:30 -13:30
Iraupena	12 ordu
Tokia	Martina Casiano plataforma teknologikoa eta Zientzia eta Teknologia Fakultateko Bizkaiko Campusa (Leioa) Euskal Herriko Unibertsitatea UPV/EHU

Hizlariak eta irakasleak:

Leire San Felices doktorea.

Ikastaroaren helburuak:

1. X Izpien, Molekulen eta Materialen Unitatearen aukerak eta ahalmenak azaltzea, beira bakarreko egitura-bereizmenean.
2. Azaldu kristalbakarreko difraktometro baten ezaugarri nagusiak.
3. Kalitate-laginak lortzeko eta aukeratzeko irizpideak ezartzea, eta neurtzeko baldintza egokiak ezartzea.
4. Adibide praktikoekin azaltzea datuak eskuratzeko eta tratatzeko prozesu osoa, eta egitura ebaztea, kristalbakarreko datuetatik abiatuta.
5. Lortutako emaitzak, aurkezpena eta horietatik ahalik eta informazio gehien nola atera aztertzea.
6. Eskola praktikoak egiturak ebazteko eta fintzeko ordenagailuarekin egitea, Olex2 programa.
7. Datu-base kristalografikoak aurkeztea (CSD, ICSD...). Erabilgarritasuna eta erabilera.



Ikastaroaren edukiak:

1. Kristalbakarreko difraktometroa: geometria eta osagaiak.
2. Kristalizatzeko teknikak edo metodoak ebaluatzea.
3. Beira bakarrak hautatzeko eta difraktometroan muntatzeko irizpideak.
4. Datuak hartzea eta murriztea.
5. Egitura-bereizmena eta software aplikagarria.
6. Emaizak aurkeztea eta interpretatzea. Informazio Kristalografikoko Fitxategiak (IFK).
7. Egiturak ebazteko adibide gidatuak. Hartune erreal desberdinetako datuak tratatzeko klase praktikoak. (Olex2)
8. Datu-base kristalografikoak (CSD, ICSD...): erabilgarritasuna eta erabilera.

Parte hartzailearen profila:

Materialen karakterizazioarekin lotutako langileak, ikertzaileak eta profesionalak.
(X izpien difrakzioaren oinarriko ezagutzak izatea gomendatzen da)

Parte hartzaile kopurua (gutxienekoa/gehienezkoa):

5/15

Kontaktua

- **Leire San Felices Mateos** doktorea
- X izpien Zerbitzu Orokorra
- Zientzia eta Teknologia Fakultatea eta **Martina Casiano** plataforma teknologikoa / Euskal Herriko Unibertsitatea
- Sarriena Auzoa, z/g, Leioa, 48940
- Tfno.: 94 601 3488
- leire.sanfelices@ehu.eus

Prezioa

- UPV/EHUkoek: 125 €
- IEPkoek: 250 €
- Kanpokoek: 400 €

Informazio gehigarria:

- Ikastaroa gaztelaniaz emango da.
- Praktikak egiteko behar diren segurtasun-neurriak hartuko dira uneoro.
- Bertaratze-ziurtagiria emango da. Ikastarora joaten direnek ziurtagiri hori jasoko dute, baldin eta derrigorrezko zatiaren iraupen osoaren % 80 gutxienez bete badute.



Oferta formativa SGIker (Servicios Generales de Investigación)

Título del curso:

Taller de reducción de datos de difracción de monocristal, resolución y refinamiento de estructuras con Olex2.

Fechas	Desde el 15 al 17 de setiembre de 2025
Horario	09:30 13:30
Duración	12 horas
Lugar	Plataforma Tecnológica Martina Casiano y FCyT Campus de Bizkaia (Leioa) Universidad del País Vasco UPV/EHU

Ponentes y formadores:

Dra. Leire San Felices.

Objetivos que se pretenden alcanzar en el curso:

1. Exponer las posibilidades y capacidades de la Unidad de Rayos X Moléculas y Materiales en resolución estructural de monocristales.
2. Exponer las características principales de unos difractómetros de monocristal.
3. Establecer criterios para obtener y elegir muestras de calidad, y establecer las condiciones de medida adecuadas.
4. Explicar con ejemplos prácticos el proceso completo de adquisición y tratamiento de datos, y resolución estructural a partir de datos en monocristal.
5. Analizar los resultados obtenidos, su presentación y cómo extraer la mayor información posible de ellos.
6. Realización de clases prácticas con ordenador de resolución y refinamiento de estructuras, programa Olex2.
7. Presentar las diferentes bases de datos cristalográficas (CSD, ICSD...). Disponibilidad y uso.



Contenidos que se van a trabajar durante el curso:

1. El difractor de monocristal: Geometría y componentes.
2. Evaluación de las técnicas o métodos de cristalización
3. Criterios de selección de monocristales y montaje de los mismos en el difractor.
4. Toma y reducción de datos.
5. Resolución estructural y software aplicable.
6. Presentación e interpretación de los resultados. Ficheros de Información Cristalográfica (CIF).
7. Ejemplos guiados de resolución de estructuras. Clases prácticas de tratamiento de datos de diferentes tomas reales. (Olex2)
8. Bases de datos cristalográficos (CSD, ICSD...): Disponibilidad y uso.

Perfil del participante:

Personal, investigadores y profesionales vinculados a la caracterización de materiales.

(Se recomienda tener conocimientos básicos de difracción de Rayos X).

Número de participantes (mínimo/máximo):

5/15

Datos de contacto

- **Dra. Leire San Felices Mateos**
- Servicio General de Rayos X
- Facultad de Ciencia y Tecnología y Plataforma Tecnológica Martina Casiano / Universidad del País Vasco/ Euskal Herriko Unibertsitatea
- Bº. Sarriena s/n, Leioa, 48940
- Tfno.: 94 601 3488
- leire.sanfelicis@ehu.eus

Precio

- Usuarios de la UPV/EHU: 125 €
- Usuarios de Organismos Públicos de Investigación: 250€
- Usuarios externos: 400 €

Otra información adicional:

- El curso se imparte en castellano.
- Se seguirán en todo momento las medidas de seguridad necesarias para realizar las prácticas.
- Se entregará certificado de asistencia. Los y las asistentes al curso recibirán dicho certificado siempre y cuando hayan completado al menos el 80% de la duración total de la parte obligatoria.



SGIker training courses offered (Advanced Research Facilities)

Course title:

Single Crystal Diffraction Data Reduction Workshop, Resolution and structure refinement with Olex2.

Dates	From September 15 to 17, 2025
Hour	09:30 13:30
Duration	12 hours
Course venue	Martina Casiano Technological Platform and Faculty of science and technology. Bizkaia Campus (Leioa) University of the Basque Country UPV/EHU

Speakers and trainers:

PhD. **Leire Sanfelices.**

Objectives to be fulfilled during the course:

1. Explain the possibilities and capabilities of the Molecules and Materials X-ray Unit in structural resolution of single crystals.
2. Explain the main characteristics of a single crystal diffractometer.
3. Establish criteria to obtain and choose quality samples and establish appropriate measurement conditions.
4. Explain with practical examples the complete process of data acquisition and processing, and structural resolution from single crystal data.
5. Analyze the results obtained, their presentation and how to extract as much information as possible from them.
6. Carrying out practical classes with a computer on resolution and refinement of structures, Olex2 program.
7. Present the different crystallographic databases (CSD, ICSD...). Availability and use.



Content that is going to be worked on during the course:

1. The single crystal diffractometer: Geometry and components.
2. Evaluation of crystallization techniques or methods.
3. Criteria for selecting single crystals and mounting them in the diffractometer.
4. Data collection and reduction.
5. Structural resolution and applicable software.
6. Presentation and interpretation of the results. Crystallographic Information Files (CIF).
7. Guided examples of solving structures. Practical classes on data processing from different real shots. (Olex2).
8. Crystallographic databases (CSD, ICSD...): Availability and use.

Participant profile:

Staff, researchers and professionals linked to the characterization of materials.

(It is recommended to have basic knowledge of X-ray diffraction)

Number of participants (minimum/maximum):

5/15

Contact

- PhD. **Leire San Felices Mateos**
- X-Ray Facility
- Martina Casiano Technology Platform and Faculty of Science and Technology
- Bº. Sarriena s/n, Leioa, 48940
- Phone: 94 601 3488
- leire.sanfelices@ehu.eus

Course fee

- UPV/EHU users: 125 €
- PRB users: 250€
- External users: 400 €

Other additional information:

- The course is taught in Spanish.
- The necessary security measures to carry out the practices will be followed at all times.
- A certificate of attendance will be delivered. Those who attend the course will receive said certificate as long as they have completed at least 80% of the total duration of the compulsory part.