

### 516 - Cristalografía

Carácter del curso	Obligatorio y electivo para las carreras de Químico
Semestre en que se dicta	7° Semestre
Número de créditos	7
Carga horaria semanal (hs)	Clases teóricas/prácticas: 4 Horas
Previaturas	Física 102
Cupo	----

**Estructura Responsable:**

DETEMA, Cátedra de Física, Laboratorio de Cristalografía, Estado Sólido y Materiales (Cryssmat-Lab)

**Docente Responsable:**

Leopoldo Suescun

**Docentes Referentes:**

Leopoldo Suescun

Guzmán Peinado

**Objetivos:**

- Introducir al estudiante en las técnicas de estudio estructural de materiales cristalinos que utilizan la difracción de rayos X, así como en los criterios de trabajo a seguir de acuerdo con la información accesible por cada método.
- El estudiante debe ser capaz de egresar del curso con una visión general de las técnicas englobadas como difracción de rayos X, así como de la aplicabilidad de las mismas en la determinación de la estructura química.

**Contenido:**

**Temas**

**1)- INTRODUCCIÓN Y USO DE RAYOS X.**

Importancia de la cristalografía estructural y su complementación con técnicas espectroscópicas.

Rayos X, Naturaleza y Producción. Características de la radiación utilizada para difracción. Radiación sincrotrónica.

**2)- EL ESTADO CRISTALINO – CRISTALIZACIÓN.**

Descripción del estado cristalino. Cristalización. Obtención de monocristales. Práctica.

**3)- SIMETRÍA.**

Elementos de simetría. Celda Unidad. Redes bi y tridimensionales. Sistemas cristalinos. Grupos puntuales. Grupos Espaciales. Manejo de Tablas Internacionales. Ejercicios.

**4)- DIFRACCIÓN CRISTALINA.**

Difracción de Rayos X por un Cristal. Índices de Miller, Ley de Bragg. Espacio Directo, Retículo Recíproco. Esfera de Ewald y Esfera Limitante. Ejercicios.



## Manual de los Programas de Asignaturas Plan 2000

Matriz métrica y cálculos cristalográficos. Ejercicios.

Difracción por un átomo. Factor de Scattering Atómico y Factor de Estructura. Factor de Temperatura.

### 5)- DIFRACCIÓN DE POLVO CRISTALINO.

Difractometría de polvo. Ventajas y aplicabilidad del método. Información accesible. Ejemplos. Práctica.

### 6)- DIFRACCIÓN DE MONOCRISTALES.

Difractometría de cristal único. Ventajas y aplicabilidad del método. Información accesible. Ejemplos. Práctica Demostrativa.

### 7)- PROCESAMIENTO DE DATOS.

Medidas y correcciones de Intensidad de Difracción, Correcciones de Lorentz y Polarización. Corrección por absorción. Estadísticas de Intensidad – Wilson plot. Práctica Demostrativa.

### 8)- RESOLUCIÓN Y REFINAMIENTO ESTRUCTURAL.

Estrategias de resolución de Estructura Química mediante datos difractométricos de monocristal y polvo.: Métodos Directos, Método del Átomo Pesado de Patterson. Análisis de Fourier.

Técnicas de refinamiento de datos difractométricos de monocristal. Práctica Demostrativa. Técnicas de Refinamiento Estructural mediante datos difractométricos de materiales policristalinos: Método de Rietveld. Práctica Demostrativa.

### 9)- DIFRACCIÓN DE MACROMOLÉCULAS BIOLÓGICAS Y OTRAS TÉCNICAS CRISTALOGRÁFICAS..

Etapas previas. Obtención de monocristales. Recolección de datos. Técnicas de resolución estructural. Refinamiento. Difracción de Neutrones. Estructura local vs. estructura global (EXAFS, PDF).

### Bibliografía:

- ☐ "X-Ray Crystallography". M. M. Woolfson.
- ☐ "X-Ray Structure Determination". G. H. Stout, L. H. Jensen.
- ☐ "The Powder Method". L. V. Azaroff, M. J. Buerger.
- ☐ "The determination of Crystal Structures". H. Lipson, W. Cochran.
- ☐ "Introducción a la Cristalografía". Donald E. Sands.
- ☐ "Cristalografía". J. Amigó, L. Briansó, C. Briansó, R. Coy Yll, J. Solans.
- ☐ "Fundamentals of Crystallography". IUCr Text on Crystallography 2. Ed. by C. Giacovazzo.
- ☐ International Tables for Crystallography (1996), Volume A, "Space-group symmetry", Fourth, revised edition, Edited by Theo Hahn, Kluwer Academic Publishers.
- ☐ <http://www.iucr.org/iucr-top/comm/cteach/index.html#Pamphlets>



## Manual de los Programas de Asignaturas Plan 2000

**Modalidad del Curso:**

	Teórico	Practico	Laboratorio	Otros (*)
Asistencia Obligatoria	12 semanas	3 semanas práctico.		
Modalidad Flexible (carga horaria mínima)				

(\*) Especificar (talleres, seminarios, visitas, tareas de campo, pasantías supervisadas, etc.)

**Régimen de ganancia:**

2 controles de 25 y 35 puntos a mitad y final de semestre respectivamente. Se gana derecho a examen con 18 puntos o más, se exonera el examen con 31 puntos o más.

Por mayor información visitar la página del curso o consultar directamente en la estructura responsable de la asignatura