

1968  
1

CRISTALOGRAFIA (difracción de rayos X)

Año lectivo 1964

1. **Cristales:** Definición, propiedades físicas generales, propiedades ópticas. Celda unitaria, planos cristalográficos, celdas de Bravais, simetría puntual, grupos espaciales.
2. **Geometría de Difracción:** Teoría elemental, condiciones de reflexión, red recíproca. Naturaleza de rayos X, diagramas de polvo de rotación, Weissenberg, precesión, Laue.
3. **Aplicaciones:** Determinación de pesos moleculares, análisis cualitativo, análisis cuantitativo, Ley de Vegard, tensiones internas, tamaño de partícula.
4. **Intensidad de Difracción:** Difracción por un átomo, por gases, líquidos y cristales. Densidad electrónica, transformada de Fourier.
5. **Difracción en cristales:** Factor de estructura, extinción, simetría en espacio de Fourier, determinación de grupos espaciales, determinación de estructuras simples.
6. **Métodos estructurales:** Problema de las fases, métodos de Fourier, de Patterson, algebraicos, estadísticos.
7. **Intensidades en cristales reales:** Intensidad absoluta, absorción, factor de temperatura. Efectos dinámicos.
8. **Refinamientos de estructuras:** Método de cuadrados mínimos, síntesis de Fourier de diferencia, usos de computadoras. Exactitud de parámetros.  
Aplicaciones: Química teórica, amplitudes de vibración.