

DEPARTAMENTO: Química Inorgánica, Analítica y Química Física

ASIGNATURA: Cristalografía

CARRERA: Licenciatura en Ciencias Químicas ORIENTACION Química Física

PLAN: 1961

CARACTER: Optativo

DURACION DE LA MATERIA: Cuatrimestral

HORAS DE CLASE: a) Teóricas 2 hs. b) Problemas 2 hs. c) Laboratorio 4 hs. (semanales) d) Seminarios--hs. e) Totales 8 hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Química Física (II).--ca.

PROGRAMA

1.- Difracción de rayos X

Introducción. Consideraciones generales, generación de rayos X. Cristales, sistemas cristalinos. Redes de Bravais. Difracción de rayos X y determinación de constantes de cristales únicos. Ley de Bragg. Método de polvo. Indexado en cristales únicos.--

2.- Simetría espacial

Determinación de simetría molecular, elementos de simetría que implican traslación, ausencias sistemáticas. Grupos espaciales. Grupos puntuales. Determinación de grupos espaciales. Determinación de longitudes de unión a partir de las dimensiones de la celda unitaria.--

3.- Propiedades de los rayos X y sus mediciones

Espectro de rayos X de un elemento. Espectro continuo de rayos X. La absorción de rayos X. Monocromatización de rayos X. Efectos fotográficos. La intensidad de difracción. Cristales perfectos e imperfectos. Extinción primaria y secundaria. Intensidades absolutas y relativas. Factores que afectan la intensidad de difracción. Factor de polarización.--

4.- Redes, planos, índices

Índices, notaciones. Índices de Miller. Interpretación de la Ley de Bragg en el espacio recíproco. Desarrollo vectorial de la red recíproca.--

5.- Técnica de polvo

Método de Debye y Sherrer. Descripción de la cámara. Geometría. Alineamiento de la cámara. Preparación y montaje de la muestra. Método de trabajo. Identificación de sustancias.

6.- Teoría de rotación y oscilación

Coordenadas cilíndricas. Indexado de las fotografías de un cristal rotatorio. Operaciones trigonométricas expresadas en las coordenadas cilíndricas de la red recíproca. Transformación de las coordenadas de la red recíproca a coordenadas del film y viceversa. Cartas de Bernal. Curvas a ρ constante. Capas lineales de las fotografías. Determinaciones de las dimensiones de las celdas unitarias. Indexado de las fotografías del cristal rotatorio, indeterminaciones. Parte experimental.

- 7.- Método del film deslizando
Método de Weissenberg. Relación entre Weissenberg y las fotografías
fijas de rotación. Ubicación de las manchas fotográficas.-

BIBLIOGRAFIA

- 1.- The determination of Molecular Structure, P.J. Wheatley, Oxford at the Clarendon Press, 1960.-
- 2.- X Ray Structure Determination, G.H. Stout y L.H. Jensen.-
- 3.- X Ray Cristal Structure D. Mc Lachlan, Jr. Mc Graw - Hill Book Co. Inc.-
- 4.- Elementary Crystallography M.J. Buerger, John Wiley and Sons. Inc. N.Y.

Fecha: 26/FEB/81

Firma del Profesor: *Olga B. de Mandirola*

Firma del Director: *[Signature]*

Aclaración de firma: Olga B. de
MANDIROLA

Aclaración de firma: LE POSSIDONI de ALBINATI
DIRECTORA DEL BPTO. DE
QUIMICA INORGANICA ANALITICA
Y QUIMICA - FISICA

O. Bricux de Mandirola

Aprobado por Resolución CA 488/81