



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

Ciudad Autónoma de Buenos Aires, 13/11/09

Señora Secretaria Académica  
de la Facultad de Ciencias  
Exactas y Naturales  
S/D

Tengo el agrado de dirigirme a la señora Secretaria Académica a efectos de comunicarle el desarrollo del curso de post-gradado y/o doctorado que se dictará en este Departamento durante el ...1ER... cuatrimestre de 2010.

- 1- Denominación del Curso: **Cristalografía y Difracción: Fundamentos y aplicaciones.**
- 1a- Carácter del Curso: ampliar conocimientos.  
(para Doctorado: ampliar conocimientos, actualización, extensión profesional)
- 2- Fecha de iniciación: 1er. cuatrimestre
- 3- A dictarse en: **Depto. de Qca. Inorgánica, Analítica y Qca. Física**
- 4- Responsable (s): Dr. Fabio Doctorovich, Dr. Daniel Vega y Dr. Ricardo Baggio  
(si no revistan en la Facultad, adjuntar nota solicitando la autorización pertinente, la que comprenderá el dictado del Curso y la firma de las Actas de Examen pertinentes).  
(Además agregar curriculum vitae resumido, debidamente firmado por el Director de Departamento o por el interesado).
- 5- Cantidad de horas semanales: 144 hs. totales
- 5a- Nro. de horas semanales de clases teóricas y problemas: 3 hs.
- 5b- Nro. de horas semanales de clases de problemas:
- 5c- Nro. de horas semanales de laboratorio: 6 hs.
- 6- Condiciones de ingreso: Título de grado o afín.
- 7- Nro. de alumnos (mínimo y máximo): 5-30
- 8- Forma de evaluación: Promocional con 7 puntos (un examen teórico al final de la materia y para la parte de laboratorio la resolución completa de una estructura con entrega de un informe incluyendo el archivo .CIF).
- 8a- Certificado de aprobación: SI-NO (tachar lo que no corresponda)
- 9- Puntaje propuesto de acuerdo con el carácter del curso: 5 (cinco)
- 10- Nro. de código: nuevo
- 11- Se acompaña despacho de la Sub-Comisión Departamental con Vº.Bº. del Director de Departamento.
- 12- Se propone un arancel de ...300.....módulos, teniendo en cuenta como base el valor de \$ .....(el que rija en ese momento).

Dr. LUIS M. BARALDO VICTORICA  
DIRECTOR  
DPTO. QUIMICA INORGANICA  
ANALITICA Y QUIMICA FISICA

D. ESTRIN

10/11/09  
6



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

CARRERA: Doctorado en Ciencias Químicas / Posgrado

CUATRIMESTRE: Primero

AÑO: 2010

CODIGO DE CARRERA: 51

MATERIA: **Cristalografía y Difracción: Fundamentos y aplicaciones.**

CODIGO: nuevo

PUNTAJE: 5 (cinco)

PLAN DE ESTUDIO: -----

CARÁCTER DE LA MATERIA: -----

DURACIÓN: cuatrimestral

HORAS DE CLASE SEMANAL:

- Teóricas y problemas: 3hs.
- Laboratorio: 6hs.

TOTAL: 9 hs.

CARGA HORARIA TOTAL: 144

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Título de grado o afín.

FORMA DE EVALUACIÓN: Promocional con 7 puntos (un examen teórico al final de la materia y para la parte de laboratorio la resolución completa de una estructura con entrega de un informe incluyendo el archivo .CIF).

PROGRAMA ANALÍTICO:

**Objetivos:**

Que el estudiante adquiera conocimientos básicos sobre cristalografía y difracción de rayos X. Introducir al estudiante en la problemática de la resolución y refinamiento de estructuras cristalinas, según la necesidad de cada uno de ellos, despertando su particular interés por esta área de la ciencia.

Dr. LUIS M. BARALDÓ-VICTORIA  
DIRECTOR  
DPTO. QUIMICA INORGANICA  
ANALITICA Y QUIMICA FISICA





## FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

### Contenidos:

#### Unidad 1: Cristalografía

El estado cristalino. Naturaleza de las fuerzas interatómicas, distancias interatómicas, ideas empíricas del radio iónico, poliedros de coordinación, valencia electrostática, las ideas de Born, uniones covalentes.

Redes y Celdas Elementales. Redes, vectores translación, redes centradas, parámetros de red, celdas elementales, celda reducida (Niggli), simetría de redes, coordenadas atómica, ejemplos de estructuras simples: cobre, hierro, magnesio.

Direcciones y Planos cristalográficos. Idea intuitiva a partir de la forma externa cristalina, planos cristalinos, ley de los índices racionales, índices de Miller, direcciones, ejes de zona, familias de planos y el espaciado interplanar: índices de Bragg, la red recíproca y algunas de sus propiedades.

Elementos y Operaciones de simetría puntuales. Elementos de simetría puntual: centro de inversión, plano especular, ejes de rotación, ejes de inversión, notación, combinación de elementos, los grupos puntuales, aplicaciones a los poliedros de coordinación (tetraedro, octaedro y cubo) y moléculas simples (benceno y metano).


Elementos y Operaciones de simetría cristalinos. Elementos de simetría con traslación, restricciones, planos con deslizamiento, ejes roto-translacionales, el plano con deslizamiento "d", redes de Bravais, sistemas cristalinos, grupos espaciales, representación, símbolos y notación, lectura de tablas e interpretación, la unidad asimétrica, relación entre  $V$ ,  $Z$  y  $\rho$ , derivación de las coordenadas atómicas, las posiciones especiales, ejemplos y aplicaciones.

Transformaciones geométricas. Cambios de origen, cambios de celda, cambios de coordenadas producidas por cambios de celda, cambios en los vectores recíprocos y en los índices, cambios en los símbolos de la red y del grupo espacial, ejemplos Sub- y super- redes, maclas. Tensor métrico, cálculos usuales, ejemplos. Aplicaciones. Estructuras de óxidos sencillas: perovskita y cristobalita. Transiciones de fases en estructuras perovskitas. Puentes hidrógeno (importancia de las interacciones débiles), Ejemplo  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  y sus transiciones de fases.

#### Unidad 2: Difracción

Conceptos matemáticos útiles. Función de Dirac, función de red, transformada de Fourier (ejemplos), producto de convolución (ejemplos). Fuentes de radiación. Generación de rayos X, espectro discreto y continuo, fenómeno de absorción y filtros, generadores de tubo sellado y ánodo rotatorio, sincrotron. Otras fuentes: electrones y neutrones. Dispersión (Scattering) de ondas. Interferencia entre ondas (dispersión coherente e incoherente), redes de difracción, difracción por un cristal, enfoque de Bragg y Laue-Ewald, factor de forma atómico, factor de estructura, dispersión anómala, la re-aparición de la red recíproca, simetrías en la distribución de intensidades: grupos de Laue. La experiencia de difracción por material cristalino. Difracción por muestras mono y policristalinas, técnicas experimentales e instrumentos usuales, ventajas comparativas de cada método, factor de Lorentz-polarización, el problema de las fases: relación entre factor de estructura e intensidad, relación entre fases y coordenadas atómicas, cálculo de

2/3

  
Dr. LUIS M. BARALDO VICTORICA  
DIRECTOR  
DPTO. QUÍMICA INORGÁNICA  
ANALÍTICA Y QUÍMICA FÍSICA





## FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

densidad electrónica. Cristales reales. Efectos térmicos: factor de Debye-Waller, fenómeno de extinción primaria y secundaria, simetrías en la distribución de intensidades: regla de Friedel, pares de Bijvoet, aplicaciones en la determinación de la estructura absoluta.

Unidad 3: Obtención de cristales

Nucleación primaria y secundaria. Efectos de las impurezas presentes. Crecimiento de cristales. Polimorfos. Recristalización. Resolución de racematos. Separación de polimorfos. Técnicas industriales.

Unidad 4: Predicción de estructuras cristalinas. Ingeniería de Cristales. Diseño de materiales mediante modelos computacionales de cristales. Polimorfismo. Test ciegos (blind tests).

Unidad 5: Resolución de estructuras cristalinas

Métodos en el espacio directo. Ensayo y error. Método de Montecarlo y recocido simulado. Métodos en el espacio recíproco. Métodos de átomo pesado, función de Patterson, reemplazo isomorfo. Métodos directos: multisolución y adición simbólica. Métodos de Fourier. Cálculo de la densidad electrónica, síntesis de Fourier, síntesis de Fourier diferencias.

Unidad 6: Refinamiento de estructuras cristalinas

Teoría de Cuadrados Mínimos. Aplicación a monocristales. Aplicación a policristales (Método de Rietveld).

Unidad 7: Análisis de Resultados

Resultados directos y derivados. Evaluación de la calidad de los datos reportados.

### **BIBLIOGRAFIA:**


- Giacovazzo, Carmelo, H. L. Monaco, D. Viterbo, F. Scordari, G. Gilli, G. Zanotti, and M. Catti; *Fundamentals of Crystallography*, 2nd Edition, 2002.
- Stout, George H.; Jensen, Lyle H.; *X-Ray Structure Determination: A Practical Guide*, 2nd ed.; Wiley-Interscience: New York, 1989.
- Massa, Werner; *Crystal Structure Determination*, 2nd Edition, 2004.
- William Clegg, A. J. Blake, R. O. Gould and P. Main; *Crystal Structure Analysis: Principles and Practice*, 1st Edition, 2002.
- Woolfson, Michael M.; *An Introduction to X-ray Crystallography*, 2nd Edition, 1997.
- Young, R. A. (editor); *The Rietveld Method*, 1st Edition, 1995.
- International Tables for Crystallography; Volume A: Space-group symmetry, Published for the INTERNATIONAL UNION OF CRYSTALLOGRAPHY by SPRINGER.

  
Dr. Fabio Doctorovich

Dr. Daniel Vega

Dr. Ricardo Baggio

3/3

  
Dr. LUIS M. BARALBO VICTORICA  
DIRECTOR  
DPTO. QUIMICA INORGANICA  
ANALITICA Y QUIMICA FISICA



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 497.825/2009

Buenos Aires, 17 MAY 2010

VISTO:

la nota presentada por los Dres. Luis M. Baraldo Victorica, Director del Departamento de QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA mediante la cual eleva la Información y el Programa del Curso de posgrado **CRISTALOGRAFIA Y DIFRACCIÓN: FUNDAMENTOS Y APLICACIONES**, que será dictado en el primer cuatrimestre de 2010 por el Dr. Fabio Doctorovich (FCEN), el Dr. Daniel Vega (UNSAM y CNEA) y el Dr. Ricardo Baggio (CNEA)

CONSIDERANDO:

- lo actuado por la Comisión de Doctorado el 22/02/2010,
- lo actuado por la Comisión de Enseñanza, Programas, Planes de Estudio y Posgrado,
- lo actuado por la Comisión de Presupuesto y Administración,
- lo actuado por este cuerpo en Sesión Ordinaria realizada en el día de la fecha,
- en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo N° 113° del Estatuto Universitario,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE  
CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
**RESUELVE:**

Artículo 1°: Autorizar el dictado del Curso de Posgrado **CRISTALOGRAFIA Y DIFRACCIÓN: FUNDAMENTOS Y APLICACIONES** de 144 Horas de duración.

Artículo 2°: Aprobar el Programa Analítico del Curso de Posgrado **CRISTALOGRAFIA Y DIFRACCIÓN: FUNDAMENTOS Y APLICACIONES**, obrante a fs 10,11 y 12 del Expediente de la Referencia.

Artículo 3°: Aprobar un puntaje de cinco (5) puntos para la Carrera de Doctorado.

Artículo 4°: Aprobar un Arancel de 300 Módulos. Disponer que los montos recaudados sean utilizados conforme a lo dispuesto por Resolución CD N° 072/03.

Artículo 5°: Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, a la Biblioteca de la FCEyN y a la Subsecretaría de Postgrado (con fotocopia del programa (fs 10 a 12) incluida), Comuníquese a la Dirección de Alumnos (sin fotocopia del Programa). Cumplido, archívese.

Resolución CD N°  
SP/med/ 23/02/2010

1093 ==

Dr. JAVIER LÓPEZ DE CASENAVE  
SECRETARIO ACADEMICO ADJUNTO

Dr. JORGE ALIAGA  
DECANO