



QIN 2016  
4

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

**CARRERA:** Posgrado / Doctorado

**CUATRIMESTRE:** SEGUNDO

**AÑO:** 2016

**CODIGO DE CARRERA:** 51

**MATERIA:** CRISTALOGRAFÍA: FUNDAMENTOS Y APLICACIONES

**CODIGO:** nuevo

**PUNTAJE:** 3 (tres)

**DURACIÓN:** bimestral (8 semanas)

**HORAS DE CLASE SEMANAL:**

- Teóricas/problemas: 6 hs.
- Laboratorio: 4 hs.

**TOTAL:** 10 hs.

**CARGA HORARIA TOTAL:** 80 hs.

**CONDICIONES DE INGRESO:** Tener título de grado de las carreras de química, física, geología o biología.

**FORMA DE EVALUACIÓN:** Promocional con 7 puntos (examen teórico al final de la materia; presentación oral y entrega de un informe de lo actuado en el laboratorio)

**PROGRAMA ANALÍTICO:**

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.

CFyA\_1/4

Dra. M. GABRIELA LAGORIO  
SECRETARIA ACADEMICA  
DEPTO. QUIMICA INORGANICA  
ANALITICA y QUIMICA FISICA



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

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

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.

Puentes hidrógeno y halogeno (importancia de las interacciones débiles), 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 poli-cristalinas, 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 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.

CFyA\_2/4

Dra. M. GABRIELA LAGORIO  
SECRETARIA ACADEMICA  
DEPTO. QUIMICA INORGANICA  
ANALITICA y QUIMICA FISICA



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

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

### Unidad 3: Obtención de cristales y crecimiento cristalino

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

### Unidad 4: 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.

Charge Flipping.

Cálculo de la densidad electrónica, síntesis de Fourier, síntesis de Fourier diferencias.

### Unidad 5: Refinamiento de estructuras cristalinas

Teoría de Cuadrados Mínimos

Aplicación a monocristales

Ley de Twins. Resolución de twins

### Unidad 6: Análisis de Resultados

Resultados directos y derivados

Evaluación de la calidad de los datos reportados.


Elaboración de reportes cristalográficos y archivos cif.

Utilización de bases de datos cristalográficos

### Bibliografía:

- (1) Cambridge Crystallographic Data Center - Single Crystal Data Base.
- (2) International Center for Diffraction Data - Powder Data Base.
- (3) International Tables of X-Ray Crystallography. Current Volumes in Hunter's Office and/or X-Ray Lab. Old Edition: QD 945.I55 1965 V.1 V.2 V.3
- (4) A. Guinier, "X-ray Diffraction in Crystals, Imperfect Crystals, and Amorphous Bodies", 1963, W. H. Freeman, San Francisco. QD 945.G943
- (5) G. Rhodes, "Crystallography Made Crystal Clear: A Guide for Users of Macromolecular Models", 1993, Academic Press, San Diego. QP 551.R48 1993
- (6) H. Lipson, "Crystals and X-rays", 1970, Wykeham, London. QD 945.L522
- (7) H. Lipson, "Interpretation of X-ray Powder Diffraction Patterns", 1970, St. Martin's Press, NY. QD 945.L52
- (8) H. W. Wyckoff, C. H. W. Hirs, and Serge N. Timasheff, "Diffraction Methods for Biological Macromolecules/Part A", 1985, Academic Press, Orlando, FL. QP 601.M49 vol. 114
- (9) H. W. Wyckoff, C. H. W. Hirs, and Serge N. Timasheff, "Diffraction Methods for Biological

CFyA\_3/4

  
Dra. M. GABRIELA LAGORIO  
SECRETARIA ACADEMICA  
DEPTO. QUIMICA INORGANICA  
ANALITICA y QUIMICA FISICA



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

- Macromolecules/Part B" 1985, Academic Press, Orlando, FL. QP 601.M49 vol. 115.
- (10) I. Hargittai and M. Hargittai, "Symmetry Through the Eyes of a Chemist", 1995, Plenum, NY. QD 461.H268 1995
- (11) J. P. Glusker, M Lewis, and M. Rossi, "Crystal Structure Analysis for Chemists and Biologists", 1994, VCH, NY. QD 945.G583 1994
- (12) M. C. F. Ladd and R. A. Palmer, "Structure Determination by X-Ray Diffraction", 3rd Edition, 1993, Plenum, NY. [1st edition: QD 945.L32 (1977). 2nd edition: QD 945.L32 1985.]
- (13) M. M. Woolfson, "An Introduction to X-ray Crystallography", 1970, Cambridge University Press, Cambridge. QD 945.W58
- (14) R. Jenkins and R. Snyder, "Introduction to X-Ray Powder Diffractometry", 1993, Wiley, NY. QD 482.D5 J46 1996.

**Prof. Dr. Fabio Doctorovich**

**Dra. Florencia Di Salvo**

**Dr. Sebastián Suárez**

CFyA\_4/4

Dra. M. GABRIELA LAGORIO  
SECRETARIA ACADEMICA  
DEPTO. QUIMICA INORGANICA  
ANALITICA y QUIMICA FISICA



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 505.680

Buenos Aires, 29 FEB 2016

**VISTO:**

la nota presentada por el Dr. Darío A. Estrin, Director Adjunto del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, mediante la cual eleva la Información y el programa del curso de posgrado **Cristalografía: fundamentos y aplicaciones**, que será dictado en el segundo cuatrimestre de 2016 por el Dr. Fabio Doctorovich con la colaboración de la Dra. Florencia Di Salvo y el Dr. Sebastián Suárez,

**CONSIDERANDO:**

lo actuado por la Comisión de Doctorado

lo actuado por la Comisión de Posgrado

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°:** Aprobar el curso de posgrado de **Cristalografía: fundamentos y aplicaciones** de 80 hs. de duración.

**Artículo 2°:** Aprobar el programa del curso de posgrado **Cristalografía: fundamentos y aplicaciones** obrante a fs 3 a 6 del expediente de la referencia.

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

**Artículo 5°:** Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, a la Dirección de Alumnos y a la Secretaría de Postgrado.

**Artículo 6°:** Comuníquese a la Biblioteca de la FCEyN con fotocopia de los programas incluida, fs 3 a 6 del expediente de la referencia. Cumplido archívese.

**Resolución CD N° 0159**

SP ga 22/02/2016

Dr. JOSÉ OLABE IPARRAGUIRRE  
SECRETARIO DE POSGRADO  
FCEN - UBA

Dr. JUAN CARLOS REBORADA  
DECANO