



## Cristalografía: Fundamentos y aplicaciones

### Objetivos

Que el estudiante adquiera conocimientos básicos sobre cristalografía y difracción de rayos X. Introducir al estudiante en la problemática de la obtención de cristales, obtención de datos de difracción de rayos X de monocristal, determinación estructural a través de resolución y posterior refinamiento de datos cristalográficos. Despertar particular interés por esta área de la ciencia, mostrando el instrumental que actualmente se posee en la FCEN.

### Modalidad

Teórico-Problemas: 6 hs/semana.

Laboratorio: 4 hs/semana.

Horario 2do Cuatrimestre 2018: Ma-Ju 9 a 13 hs – Aula Seminarios INQUIMAE (3er piso lado río).

### Aprobación

Promocional con 7 puntos (examen teórico al final de la materia y para la parte de laboratorio entrega de los informes realizados).

### Correlatividades

Optativa de grado y posgrado.

- Licenciatura en Química

Química General e Inorgánica II (final), Química Orgánica II (TP), Química Física I (TP – no excluyente)

- Licenciatura en Geología

Mineralogía (TP)

### Programa – Contenidos teóricos

#### 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 cristalinis

Elementos de simetría con traslación, restricciones, planos con deslizamiento, ejes roto-translacionales, el plano con deslizamiento "d", redes de Bravais, sistemas cristalinis, 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 halógeno (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.

#### 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: 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 5: Refinamiento de estructuras cristalinas

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

#### Unidad 6: Introducción a Análisis de Resultados

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

### **Programa – Contenidos Clases de problemas**

#### Guías de Problemas 1: Interacciones y Cristalización

Guías de problemas de ejercitación de los conceptos incluidos en las unidades 1 y 3.

#### Guía de Problemas 2: Redes Cristalinas y Simetría en Cristales

Guías de problemas de ejercitación de los conceptos incluidos en la unidad 1.

#### Guía de Problemas 3: Difracción y Generación de Rayos X

Guías de problemas de ejercitación de los conceptos incluidos en la unidad 3.

#### Guía de Problemas 4: Resolución y refinamiento de Estructuras Cristalinas

Guías de problemas de ejercitación de los conceptos incluidos en la unidades 4-6.



## **Programa – Contenidos Clases de laboratorio**

### Trabajo Práctico N° 1: Cristalización y Crecimiento Cristalino.

Trabajo en el laboratorio.

Parte A. Cristalización de  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  por método de semilla.

Parte B. Curva de Solubilidad de  $\text{KNO}_3$ .

Parte C. Crecimiento de cristales de Polimorfos de Acetaminofen (paracetamol).

Parte D. Cristalización de macromoléculas: estudio de crecimiento cristalino de Lisozima

### Trabajo Práctico N° 2: Difracción.

Trabajo en el laboratorio.

Estudiar el fenómeno de difracción utilizando luz visible. Ley de Fraunhofer; ley de Bragg. Patrones de difracción. Espacio real y espacio recíproco.

### Trabajo Práctico N° 3: Base de Datos Estructural - Parte A.

Clase práctica en aula con computadoras.

Uso de programas de análisis de estructuras cristalinas. Introducción al uso de bases de datos y análisis de estructura molecular y supramolecular. Interacciones no covalentes. Análisis de diferentes formas cristalinas: polimorfos, solvatos, hidratos, co-cristales.

## **Docentes Responsables**

Dres. Fabio Doctorovich, Florencia Di Salvo y Sebastián Suarez

## **Contacto**

flor@qi.fcen.uba.ar, seba@qi.fcen.uba.ar.

**Material completo** (presentaciones de las clases teóricas, guías de problemas, guías de laboratorio, modelos de informes) solicitar a: flor@qi.fcen.uba.ar, seba@qi.fcen.uba.ar



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 62/18

Ciudad Autónoma de Buenos Aires, 26 NOV 2018

**VISTO**

La nota a foja 14 de la Secretaria Académica del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado **Cristalografía: Fundamentos y Aplicaciones**, para el año 2018,

**CONSIDERANDO**

Lo actuado en la Comisión de Doctorado,

Lo actuado en la Comisión de Posgrado,

Lo actuado por este Cuerpo en la sesión realizada en el día de la fecha,

En uso de las atribuciones que le confiere el Artículo 113° del Estatuto Universitario,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE  
CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

**RESUELVE:**

**ARTÍCULO 1°:** Aprobar el curso de posgrado **Cristalografía: Fundamentos y Aplicaciones** de 80 hs de duración, que será dictado por los Dres. Fabio Doctorovich, Florencia Di Salvo y Sebastián Suarez.

**ARTÍCULO 2°:** Aprobar programa del curso de posgrado **Cristalografía: Fundamentos y Aplicaciones**, obrante a fojas 34/37 para su dictado durante el segundo cuatrimestre de 2018.

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

**ARTÍCULO 4°:** Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, la Dirección de Estudiantes y Graduados, la Biblioteca de la FCEyN y la Secretaría de Posgrado con fotocopia del programa incluida. Cumplido archívese.

RESOLUCIÓN CD N°

2978

GA 09/11/2018

Dr. PABLO J. PAZOS  
Secretario Adjunto de Posgrado  
FCEyN - UBA

Dr. JUAN CARLOS REBOREDA  
DECANO