



## Métodos Avanzados en Cristalografía de rayos X

Carácter del curso	Postgrado
Semestre en que se dicta	
Número de créditos	10
Carga horaria semanal (hs)	
Previaturas	
Cupo	

**Estructura Responsable: Cryssmat-lab/DETEMA**

**Docentes Responsables: Leopoldo Suescun**

**Docentes Referentes: Leopoldo Suescun,**

### **Objetivos:**

- Introducir al estudiante en las técnicas más modernas de análisis estructural por difracción de rayos X de mono y policristal.
- Introducir al estudiante en otras técnicas avanzadas de caracterización por difracción o espectroscopía de rayos X.
- Enseñar a través de un trabajo práctico a aplicar una de las técnicas de análisis del curso disponible localmente a un problema concreto seleccionado por el estudiante.

### **Contenido:**

#### **Módulo 1: Difracción de Rayos X de Monocristal (duración 1 semana)**

- Monocristales: definición y obtención.
- Difractometría de monocristal, determinación de parámetros estructurales, colección de datos, procesamiento de datos.
- Métodos de resolución de estructuras a partir de datos de difracción de monocristal.
- Refinamiento estructural, uso de restricciones estructurales.
- Reporte de resultados estructurales en formato CIF (Crystallographic Information File)

#### **Módulo 2: Difracción de rayos X de Polvo (duración 1 semana)**

- Polvo policristalino, obtención y características. Difractometría de Polvo y sus aplicaciones analíticas.
- Colección de datos, indizado de diagramas de polvo, determinación del grupo espacial, extracción de intensidades de difracción del diagrama de polvo.

Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
Página 1 de 3		

- Métodos de resolución de estructuras a partir de datos de difracción de polvo.
- Refinamiento de Rietveld y aplicaciones.

### ***Módulo 3: Técnicas especiales de difracción de polvo (duración 1 semana)***

- Difracción de rayos X resonante.
- Difracción de neutrones, características y aplicaciones.
- Difracción por nanopartículas y materiales desordenados. El método de Análisis de Función de distribución de pares (Pair distribution function analysis).

### ***Módulo 4: Técnicas especiales de análisis con rayos X (duración 1 semana)***

- Determinación del tamaño de partícula de elementos dispersos. Dispersión de rayos X a bajo ángulo (Small Angle X-ray Scattering – SAXS)
- Determinación de ancho de filmes y depósitos nanométricos. Reflectometría de rayos X
- Determinación de estructura local en materiales ordenados y desordenados. Espectroscopía de absorción de rayos X (X-ray Absorption Fine Structure Spectroscopy – EXAFS)

### **Bibliografía:**

- Guinier, G. Fournet, Small angle scattering of X-ray, Wiley-New York, 1955
- V. K. Pecharsky, P. Y. Zavalij, Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials, Springer-New York, 2009.
- Giacobozzo, H. L. Monaco, D. Viterbo, F. Scordari, G. Gilli, G. Zanotti, M. Catti, Fundamentals of Crystallography, IUCr/Oxford, Oxford, 1992.
- G. Bunker, "Introduction to XAFS: A Practical Guide to X-ray Absorption Fine Structure Spectroscopy", Cambridge University Press, 2009.

### **Modalidad del Curso:**

Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
Página 2 de 3		

## Métodos Avanzados en Cristalografía de rayos X

	Teórico	Practico	Laboratorio	Otros (*)
Asistencia Obligatoria	X	<b>X</b>		
Modalidad Flexible (carga horaria mínima)				

(\*) Especificar (talleres, seminarios, visitas, tareas de campo, pasantías supervisadas, etc.)

### **Régimen de ganancia:**

El curso total consta de 4 módulos de una semana de duración cada uno y 1 mes posterior para realización del trabajo de laboratorio y entrega de un informe (evaluación final).

Durante las 4 semanas de clases se dictarán 3 clases teóricas de 2 horas y 3 clases prácticas de 4 horas cada semana. La duración del informe se estima en 30 horas totales de trabajo de laboratorio.

Los estudiantes podrán tomar los Módulos 1 y 2 del curso y realizar el trabajo/evaluación final o realizar el total de los módulos y realizar el trabajo/evaluación final.