II Escuela de la Asociación Argentina de Cristalografía

Buenos Aires, 18 - 22 de octubre de 2010.

La II Escuela de Cristalografía de la AACr se desarrollará en Buenos Aires, entre los días 18 y 22 de octubre de 2010, como evento satélite de la VI Reunión Anual de la AACr, y estará dedicada fundamentalmente a la resolución de estructuras cristalinas y moleculares por cristal único, como forma de promover en la comunidad cristalográfica el uso del equipamiento de última generación recientemente recibido (y ya en pleno funcionamiento), instalado en la Universidad de La Plata (Laboratorio LANADI) y la Universidad de Buenos Aires (Instituto INQUIMAE).

La escuela tendrá una modalidad teórico-práctica, con las mañanas dedicadas al desarrollo de los fundamentos teóricos pertinentes, a cargo del Dr. Oscar Piro (UNLP, CONICET) mientras que las tardes se dedicarán a la resolución de problemas prácticos bajo al supervisión de los Drs. Ricardo Baggio (CNEA) y Daniel Vega (CNEA, UNSAM).

Dado el carácter intensivo de la escuela, se ha gestionado ante la Universidad Nacional de San Martín la emisión de los certificados correspondientes para aquellos estudiantes que lo aprueben y así lo requieran. De esta manera, podrán tramitar en sus respectivas universidades la asignación de puntaje como materia optativa o de post-grado.

CRISTALOGRAFÍA ESTRUCTURAL
18-22 de octubre, 2010

OBJETIVO:
Que el estudiante adquiera conocimientos básicos sobre cristalografía y difracción de rayos X de monocristales. Introducir al estudiante en la problemátiac de la resolución y refinamiento de estructuras cristalinas, despertando su particular interés por esta área de la ciencia.

DOCENTES A CARGO:
Dr. Oscar Piro (UNLP, CONICET)
Dr. Ricardo Baggio (CNEA)

CARGA HORARIA Y DURACIÓN:
Carga horaria: 80hs.
Duración: 5 días
Modalidad: 4 horas de clases teóricas por las mañanas y 4 horas de clases prácticas por la tarde durante toda la semana.

EVALUACIÓN (Optativa):
Evaluación final por exposición oral.

PROGRAMA:

Simetría de los cristales
Grupos de simetría translacional y puntual.
Redes de Bravais. Sistemas cristalográficos.
Clases cristalográficas. Grupos espaciales.
Planos cristalinos: Índices de Miller.
Representación de propiedades cristalofísicas mediante series de Fourier. Red recíproca.

Física de los rayos-X
Generación y propiedades de rayos-X.
Fuentes de rayos-X: tubos, ánodo rotatorio, radiación sincrotrónica.

Dispersión de rayos-X por átomos y sólidos
Dispersión coherente de rayos-X por átomos. Factor de forma atómico.
Difracción de rayos-X por cristales. Factores de estructura. Problema de las fases.
Simetría de los factores de estructura: Grupos de Laue.
Extinciones sistemáticas: Determinación de grupos espaciales.
Colección, reducción y corrección de datos de difracción.

Resolución, desarrollo y refinamiento de estructuras cristalinas
Método de Patterson.
Métodos de Fourier.
Método de reemplazo isomorfo en macromoléculas.
Elementos de Métodos Directos. Ecuación de Sayre.
Determinación de fases. Distribución de fases de tripletes individuales.
Información múltiple de fases de tripletes: Fórmula de las Tangentes.
Método de adición simbólica.
Método de multi-soluciones.
Refinamiento del modelo estructural por métodos de cuadrados mínimos.

Aplicación a la resolución de estructuras de moléculas pequeñas por difracción de cristal único.
Resolución:
Estructuras con algún átomo pesado (Ej. Complejos de coordinación). Aplicación de Método de Patterson y Métodos Directos.
Estructuras con átomos livianos solamente (Ej. Estructuras orgánicas). Aplicación de Métodos Directos.
Ejemplos de casos triviales y otros problemáticos.
Completitud y Refinamiento por cuadrados mínimos:
Ejemplos de casos triviales y análisis de algunos problemas frecuentes (desorden, etc)

Software a usar:
Comercial: plataforma de programas de BRUKER
XPREP (procesamiento inicial de datos, determinación de Sistema Cristalino y Grupo espacial)
XP (Gráfica interactiva y cálculo de parámetros derivados)

Libre: plataforma WINGX, incluyendo la Suite de programas

SHELXS97 (resolución)
SHELXL97 (completitud y refinamiento)
PLATON (cálculo de parámetros derivados y evaluación de resultados)
ORTEP (Gráfica)

Bibliografía

J. P. Gluskes & K. N. Trueblood: " Crystal Structure Analysis: A Prime". Oxford University Press (1972).

Structure Determination by X-ray Crystallography. By M. Ladd and R. Palmer. New York: Kluwer Academic/Plenum, 4th ed. (2003).

H. Lipson & W. Cochran: "Determination of Crystal Structures". University Press, Cornell (1966).

C. Giacovazzo (Editor): "Fundamentals of Crystallography". IUCr texts on Crystallography 2, Oxford Science Publications (1992).

G. H. Stout & L. H. Jensen: "X-ray Structure Determination. A Practical Guide". Macmillan Publishing, New York (1965).