

# Programa Científico

## Curso para operadores DRX de polvo:

### Preparación de muestras, medición y procesamiento de datos.

#### **Lunes 8 de Abril**

**9 a 11 hs (Teoría):** Introducción a la cristalografía y a los métodos de difracción de polvo: propiedades de los rayos X, producción de rayos X, detectores. Introducción a la difracción de rayos X de polvo. Instrumentación: geometrías, filtros y monocromadores, fuentes de error instrumental. Difracción de rayos X y su utilidad como técnica analítica.

**Docentes:** Lamas, Conconi, Pagola

**11:30 a 13 hs (Teoría):** Simetría cristalográfica: introducción a las redes, vectores translación, parámetros de red, celdas elementales, coordenadas atómicas. Planos cristalinos, índices de Miller, direcciones, familias de planos y espaciado interplanar. Elementos de simetría. Redes de Bravais, sistemas cristalinos, grupos espaciales, tablas cristalográficas, unidad asimétrica

**Docentes:** Di Salvo, Suarez

**14 a 17 hs (Práctica):** Tipos de muestra, preparación de muestra, portamuestras, técnicas (polvos (bulk) transmisión (capilares) y reflexión (flat-plate), spinners. Fuentes de errores, cantidad de cristalitos contribuyendo al proceso de difracción, orientación aleatoria y preferencial. Preparación de muestras en el laboratorio.

**Docentes:** Cozzi, Larralde, Pagola

#### **Martes 9 de Abril**

**9 a 11 hs (Teoría):** Factor de forma atómico, factor de estructura. El problema de las fases: relación entre factor de estructura e intensidad, relación entre fases y coordenadas atómicas, cálculo de densidad electrónica. Red recíproca (TP: difracción de láseres). Factores que afectan la intensidad.

**Docentes:** Di Salvo, Suarez, Lamas

**11:30 a 13 hs (Teoría):** Colección de datos: estrategias, barrido continuo, y por pasos (tiempo de conteo y ancho de paso), observaciones independientes. Ejemplos de condiciones experimentales. Análisis de difractogramas, modelado del perfil, determinación de sus características más relevantes: radiación de fondo, posición de los máximos de difracción, intensidades relativas y anchura de los máximos. Factores que afectan las determinaciones: alineación, divergencia axial, transparencia de la muestra. Extracción de distancias interplanares a partir de los datos.

**Docentes:** Lamas, Conconi, Pagola

**14 a 17 hs (Práctica):** Colección de datos. Geometría de Bragg-Brentano. Parámetros de la colección de datos. Precauciones para evitar aberraciones y datos típicos. Práctica de laboratorio

(equipos PANalytical Empyrean y Siemens D5000). Concepto de huella digital. Identificación de fases cristalinas. Uso de base de datos.

**Docentes:** Pagola, Cozzi, Larralde.

### ***Miércoles 10 de Abril***

**11 a 13 hs (Teoría):** Indexación de patrones de difracción de polvo. Relaciones básicas, formas cuadráticas. El problema de indexar, figuras de mérito, indexado manual. Errores en las mediciones. Alternativas de uso de diversos programas. Cuadrados mínimos aplicados al refinamiento de los parámetros de celda. Ejemplos de indexado.

**Docentes:** Lamas, Larralde, Suarez, Di Salvo

**14 a 17 hs (Práctica):** Resolución de estructuras cristalinas por difracción de polvos utilizando los diferentes programas disponibles, Parte 1. Ejemplos según tipos de muestra: compuestos orgánicos (con PSSP y winPSSP), estructuras inorgánicas de óxidos de metales de transición y MOF (métodos directos y EXPO).

Utilización del programa EXPO (2004, 2009 y 2013) para resolver estructuras, indexar y determinar grupo espacial. Alternativamente, Checkcel, Celref y Truecel para determinar grupos espaciales y evaluar posibles celdas unidad. Finalmente, WinPLOT (TREOR, McMAILLE, DICVOL) para indexado y background. XFIT para el ajuste de picos de difracción.

**Docentes:** Pagola, Conconi, Larralde, Cozzi

**17 a 20 hs (Teoría):** Curso Radiofísica Sanitaria Parte 1. Capacitar en lo referente a los conceptos básicos de Radioprotección. Conocer los fenómenos físicos y biológicos de las Radiaciones ionizantes. Comprender las características de los rayos x, los blindajes y la dosimetría. Cumplir los requisitos previstos en la Ley 17557.

**Docente:** Lic. Alejandro La Pasta – Ministerio de Salud de la Nación.

### ***Jueves 11 de Abril***

**11 a 13 hs (Teoría):** Cuadrados mínimos en el refinamiento de estructuras cristalinas: factores de acuerdo. El método de Rietveld. Interpretación de los factores de acuerdo. Criterios de ajuste. Problemas comunes. Posibilidades y limitaciones de la aplicación del método de Rietveld. Indicaciones para la colección de datos en el laboratorio: selección de parámetros instrumentales y preparación de la muestra.

**Docentes:** Lamas, Conconi, Pagola, Larralde

**14 a 17 hs (Práctica):** Resolución de estructuras cristalinas por difracción de polvos utilizando los diferentes programas disponibles, Parte 2. Continuación del día anterior.

**Docentes:** Todos

**17 a 20 hs (Teoría):** Curso Radiofísica Sanitaria Parte 2, continuación del día anterior. Al finalizar se rinde un examen escrito y se entrega certificado de asistencia el cual permite obtener la Autorización Individual de uso de fuentes de rayos X (primer paso para la habilitación de los nuevos equipos).

**Docente:** Lic. Alejandro La Pasta – Ministerio de Salud de la Nación.

### ***Viernes 12 de Abril***

**9 a 13 hs (Practica):** Refinamiento de una estructura cristalina sencilla utilizando el método de Rietveld y datos de laboratorio. Se usaran los diferentes programas disponibles GSAS y Fullprof bajo plataforma WinPlotr. Introducción a GSAS-II. Se cuenta con sala de computadoras para realizar la práctica en forma individual.

**Docentes:** Todos

**14 a 17 hs (Evaluación):** Examen presencial teórico-práctico.

**Docentes:** Todos