

# Métodos de Cristalografía y Difracción de Rayos X

Prof. Dr. Javier Ellena  
Instituto de Física de São Carlos  
Universidade de São Paulo

## Programa Básico.

- Producción y propiedades de los Rayos-x.
- Introducción a la simetría cristalina: operaciones de simetría y grupos puntuales.
- Introducción a la simetría cristalina: Celdas, redes y grupos espaciales.
- Introducción a la difracción de rayos-x en la aproximación cinemática. Factor de forma y factor de estructura. Transformada de Fourier y densidad electrónica.
- Determinación del grupo espacial: ausencias sistemáticas. Como usar las Tablas Cristalográficas Internacionales.
- Dispersión de rayos X. Dispersión a bajos ángulos (SAXS). Difracción por materiales ordenados y cristalinos (DRX).
- Medidas difractométricas. Tratamiento de datos. Identificación de fases cristalinas.
- Difractómetros automáticos y colecciones de datos de difracción de Rayos-x en monocristal.
- Procesamiento de datos: Integración de las reflexiones y reducción de datos.
- Problemas de las fases: Métodos de resolución de estructuras. Función de Patterson y Métodos directos.
- Bases de datos en Cristalografía.

## Bibliografía:

- ARTIOLI, D. VITERBO, G. FERRARIS, C. GIACOVAZZO. Ed.: CARMELO GIACOVAZZO, *Fundamentals of Crystallography (Second Edition)*, International Union of Crystallography, 2002.
- AZAROFF, L.V. - *Elements of X-Ray Crystallography*, McGraw-Hill Book Co., New York, 1968.
- BUERGER, M.J. - *Elementary Crystallography*, John Wiley & Sons Inc., New York, 1956.
- BUERGER, M.J. - *X-Ray Crystallography*, John Wiley & Sons Inc., New York, 1942.
- CULLITY, B.D. - *Elements of X-Ray Diffraction*. Addison Wesley, Pub. Co. Inc., 1967.
- CULLITY, B.D. STOCK S.R.. Ed.: *STUART STOCK - Texts on Crystallography by Elements of X-Ray Diffraction (3rd Edition)*, Prentice Hall, 2001.
- LADD, MFC, Palmer R.A. *Structure Determination by X-ray crystallography*, 1993.
- KLUG & L.E. ALEXANDER. -*X-Ray Diffraction Procedures For Polycrystalline and Amorphous Materials*, Wiley-Interscience, 2nd, Edition (1974).
- STOUT AND JENSEN - *X-ray structure determination*, 1989.