

Presidencia Roque Sáenz Peña, 08 de mayo de 2025

RESOLUCIÓN N° 106/2025 - C.D.C.B. y A.

VISTO:

El Expediente N° 01-2025-01807 sobre Curso “Fundamentos y Aplicaciones de la Difracción de Rayos X de Polvos”, iniciado por el Dr. Mauro D. ACEVEDO; y

CONSIDERANDO:

Que se solicita la aprobación para el dictado del Curso “Fundamentos y Aplicaciones de la Difracción de Rayos X de Polvos”, organizado en el marco del “Programa de doctorados” (RESOL. 2023-329-APNSECPU#ME y RESOL-2024-1388-APN-SE#MCH);

Que la propuesta se fundamenta en que la difracción de rayos X es ampliamente empleada para la identificación, caracterización y estudio de diferentes sistemas en Química, Ciencias Biológicas, Ciencias de los Materiales, Ciencias Ambientales, entre otras y se utiliza con frecuencia en trabajos de investigación y desarrollo de Tesis Doctorales por lo que resulta relevante la formación de recursos humanos en esa temática;

Que el curso tiene como objetivos fundamentales introducir a los cursantes en la Cristalografía Aplicada y la técnica de Difracción de Rayos X de Polvos, incluyendo tanto los fundamentos como los aspectos experimentales y de análisis de datos más importantes y presentar, con diversos ejemplos y ejercicios que permitan comprender el interés para casos reales, las aplicaciones más importantes de la técnica;

Que el curso está destinado a alumnos de carreras de posgrado, docentes investigadores, graduados de carreras vinculadas al área de Alimentos, Química, Biotecnología, Materiales y carreras de grado afines con intención de actualizar sus conocimientos en difracción de rayos X y profesionales involucrados en el manejo de técnicas analíticas y/o encargados del aseguramiento de calidad de procesos;

Que la propuesta elevada cumple con las pautas establecidas en el Reglamento de Cursos y Carreras de Posgrado Res. 281/2021 C.S.;

Lo aprobado en sesión de la fecha.

POR ELLO:

**EL CONSEJO DEPARTAMENTAL
DEL DEPARTAMENTO DE CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS DE LA UNIVERSIDAD
NACIONAL DEL CHACO AUSTRAL**

RESUELVE:

ARTÍCULO 1°: APROBAR el dictado del Curso de Posgrado “Fundamentos y Aplicaciones de la Difracción de Rayos X de Polvos”, según el detalle que figura en el Anexo de la presente resolución.

ARTÍCULO 2°: ELEVAR al Consejo Superior para su tratamiento.

ARTÍCULO 3°: Regístrese, comuníquese, y archívese.



Nora B. Okulik
Dra. Nora B. Okulik
Directora
Dpto. de Cs. Básicas y Aplicadas



ANEXO

CURSOS DE POSGRADO

A. DATOS GENERALES DE LA ACTIVIDAD

1. DENOMINACIÓN DE LA ACTIVIDAD

Consignar el nombre del Curso de Posgrado.

“Fundamentos y Aplicaciones de la Difracción de Rayos X de Polvos”

2. ÁREA RESPONSABLE

Posgrado- Secretaría Académica

3. DURACIÓN

Consignar la duración en días, semanas o meses.

Tres semanas.

4. CARGA HORARIA

Consignar la carga horaria presencial y no presencial discriminada por horas teóricas, teórico-prácticas, prácticas.

Carga horaria virtual sincrónica: 10 horas (4 encuentros virtuales sincrónicos de 2,5 horas cada uno, con una frecuencia de 2 veces por semana).

Carga horaria presencial: 30 horas con 2 encuentros intensivos diarios de 3 horas de duración cada uno durante una semana.

Total carga horaria: 40 horas

Total de encuentros: 10

5. DESTINATARIOS Y CONDICIONES DE ADMISIÓN

Requisitos formales (credenciales educativas), de acuerdo con la tipología que se enuncia en el Artículo 14 del Reglamento, o equivalentes (experiencia o conocimientos técnico-profesionales que puedan sustituir las credenciales requeridas), y especiales (conocimientos específicos) que deberán reunir los participantes y demás condicionalidades de la convocatoria.

Alumnos de carreras de posgrado. Docentes investigadores. Graduados de carreras vinculadas al área de Alimentos, Química, Biotecnología, Materiales o carreras de grado afines, con intención de actualizar sus conocimientos en difracción de rayos X. Profesionales involucrados en el manejo de técnicas analíticas y/o encargados del aseguramiento de calidad de procesos.

6. CUPO

Especificar cupo mínimo y máximo.

Mínimo: 4 - Máximo: 15

7. CERTIFICACIÓN

Términos de la acreditación de asistencia y/o de aprobación según corresponda.

Certificado de Aprobación

La evaluación se realizará luego de la finalización del curso y tendrá carácter teórico- práctico.

Para aprobar el curso se requiere el 80% de asistencia a clases teóricas, el 100% de asistencia a las clases prácticas y la aprobación de la evaluación final.

Certificado de Asistencia

Se emitirá certificado de asistencia a quienes cumplan con todos los requisitos exceptuando la evaluación final.



[Handwritten signature]



8. PARTICIPANTES

Detalle de los docentes, panelistas, expositores, etc., las funciones que cumplirán dentro del equipo (director/a, coordinador/a, profesor/a dictante, etc.) y la síntesis curricular de los/as mismos/as. Adjuntar Curriculum Vitae.

Dr. Diego Germán Lamas (UNSAM-CONICET) (Dictante)

Dr. Mauro D. Acevedo (UNCAUS) Colaborador

Dr. Fernando N. Booth (UNCAUS) Colaborador

9. ARANCEL

Monto que se estime prudente imponer y el presupuesto establecido, en caso de que corresponda.

- **Cursantes de doctorados UNCAUS: sin costo.**
- **\$ 25000 (pesos veinticinco mil) para docentes, tesistas y becarios de la UNCAUS no incluidos en el Programa de Doctorado.**
- **\$ 50000 (pesos cincuenta mil) para cursantes externos a la UNCAUS.**
- **Entidad recaudadora: Universidad Nacional del Chaco Austral**
- **Honorarios**

Honorarios por docente: \$300.000,00-, lo cual será financiado por el Programa de Doctorado (RESOL. 2022-329-APN-SECPU#ME.), (RESOL-2024-1388-APN-SE#MCH), más 25% por inscripción de alumnos y \$100.000,00 para cada uno de los docentes colaboradores.

Gastos de traslado y estadía de la docente dictante: \$ 700.000.

B. PROGRAMACIÓN DIDÁCTICA DE LA ACTIVIDAD

1. FUNDAMENTACIÓN

Exposición sucinta de los fundamentos y lineamientos generales de la propuesta.

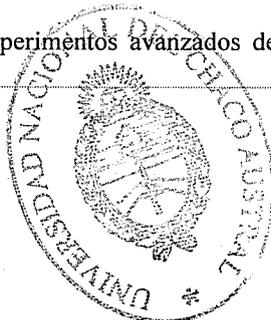
La difracción de rayos X es ampliamente empleada para la identificación, caracterización y estudio de diferentes sistemas en Química, Ciencias Biológicas, Ciencias de los Materiales, Ciencias Ambientales, entre otras. En particular, esta técnica se utiliza con frecuencia en trabajos de investigación y desarrollo de Tesis Doctorales por lo que resulta relevante la formación de recursos humanos en esa temática.

Por otra parte, gracias al Programa Equipar Ciencia la UNCAUS ha sido beneficiada con la adquisición de un equipo de Difracción de Rayos X cuyo uso permitirá profundizar los estudios realizados por los becarios, investigadores y tesistas de la Universidad y del INIPTA.

2. OBJETIVOS

Enunciación de los objetivos de la iniciativa.

- Difundir la Cristalografía y las técnicas de rayos X, en especial la difracción de polvos, en la comunidad científica-tecnológica.
- Introducir a los alumnos en la Cristalografía Aplicada y la técnica de Difracción de Rayos X de Polvos, incluyendo tanto los fundamentos como los aspectos experimentales y de análisis de datos más importantes. Se mostrarán las posibilidades de softwares y bases de datos libres.
- Presentar, con diversos ejemplos y ejercicios que permitan comprender el interés para casos reales, las aplicaciones más importantes de la técnica: análisis cualitativo, análisis cuantitativo, refinamiento de estructura cristalina, determinación del tamaño medio de cristalita de nanomateriales, etc.
- Introducir a los alumnos en el empleo del método de Rietveld tanto para refinamiento de estructura como para otras aplicaciones.
- Mostrar a los alumnos el interés de experimentos avanzados de difracción de polvos usando radiación sincrotrón.



M



3. CONTENIDOS

Indicar los contenidos mínimos que se desarrollarán durante la Actividad, según el criterio de organización adoptado, ej.: unidades, módulos, etc.

Recordar:

- que la cantidad de contenido debe ser acorde a las horas de dictado,
- que estas actividades deben atender a contenidos relevantes para la formación,
- que este punto se refiere a los contenidos seleccionados y organizados curricularmente, no a un listado minucioso de temas.

CONTENIDOS MÍNIMOS:

Fundamentos de la espectroscopia vibracional. Introducción a la espectroscopia vibracional. Grados de libertad vibracionales. Moléculas diatómicas. Espectros roto vibracionales de moléculas diatómicas. Modelo del rotor rígido. Discusión de ejemplos y análisis de espectros vibracionales. Aspectos instrumentales de la espectroscopía IR. Equipos dispersivos y por transformada de Fourier. Descripción de los componentes. Metodologías por transmisión y por reflexión. Reflectancia especular, reflectancia difusa (DRIFTS), Reflectancia total atenuada (ATR). Celdas de medida. Preparación de muestras. Nociones de simetría molecular. Modos normales de vibración. Modos de combinación y sobretonos. Formas de bandas. Ejemplos. Discusión de espectros vibracionales de moléculas poliatómicas en términos de simetría molecular. Nociones de cálculos de espectros IR en el marco de la Teoría de los Funcionales de la Densidad. Estudios estructurales y de equilibrio conformacional. Seguimiento de reacciones químicas y procesos. Caracterización de superficies utilizando FTIR: empleo de moléculas sonda. Ejemplos.

PROGRAMA ANALÍTICO COMPLETO

Introducción a la Cristalografía y a la Difracción de rayos X: fundamentos y aspectos históricos
Primeros trabajos en Cristalografía. El Nacimiento de la Cristalografía moderna: el descubrimiento de la Difracción de rayos X. Visión de la Cristalografía actual. Definición de cristales. Monocristales y policristales. Aplicaciones modernas de la Cristalografía. Aspectos históricos más importantes del nacimiento de la Cristalografía moderna y algunos hitos destacados. Avances de las fuentes de rayos X.

Introducción a los métodos de difracción de polvo y usos

Propiedades de los Rayos X. Producción de Rayos X. Tubos sellados, ánodos rotatorios y fuentes de sincrotrón. Detección de la radiación. Introducción a la difracción de rayos X de polvo. Instrumentación. La difracción de rayos X y su utilidad como técnica analítica. Análisis de difractogramas. Idea intuitiva del difractograma como huella digital de un compuesto para identificación de fases cristalinas. Otras aplicaciones.

Simetría Cristalográfica

Introducción a las redes, vectores translación, parámetros de red, celdas elementales, simetría de redes, coordenadas atómicas, ejemplos de estructuras simples. Planos cristalinos, índices de Miller, direcciones, familias de planos y el espaciado interplanar. Elementos de simetría puntual: centro de inversión, plano especular, ejes de rotación, ejes de inversión, notación, combinación de elementos, los grupos puntuales. Elementos de simetría con traslación: planos con deslizamiento, ejes rototranslacionales. Redes de Bravais, sistemas cristalinos, los grupos espaciales, representación, símbolos y notación.

El fenómeno de la difracción de rayos X

Conceptos básicos del fenómeno de la difracción de rayos X. La ley de Bragg. La teoría cinemática de la difracción de rayos X.

Fundamentos de la difracción de polvos (policristales) y aspectos experimentales

La muestra: cantidad de cristalitos contribuyendo al proceso de difracción, orientación al azar y orientación preferencial. El instrumento: los rayos X, difractómetros (diferentes geometrías), filtros y monocromadores, fuentes de error instrumental. La colección de datos: estrategias, barrido continuo y por pasos (tiempo de conteo y ancho de paso), ejemplos con diferentes condiciones experimentales.

Identificación de compuestos y bases de datos de difracción de polvo

Programas para procesamiento de difractogramas. Identificación de fases cristalinas. Uso de bases de datos (en especial las de acceso gratuito). Análisis de muestras de diversa naturaleza.



Intensidad de las líneas de difracción

El factor de forma atómico. El factor de estructura y su cálculo. El problema de las fases. Otros factores que afectan la intensidad en difracción de polvos: factor de Lorentz, factor de polarización, factor de temperatura, multiplicidad. Ejemplos.

El método de Rietveld

Fundamentos del método de Rietveld. Breve introducción al formalismo matemático del método. Posibilidades y limitaciones de la aplicación del método de Rietveld. Indicaciones para la colección de datos. Modelado de la forma de perfil de picos: distintas formas funcionales y refinamiento de parámetros de perfil. Definición de FWHM. Colección de datos en el laboratorio: selección de paso y tiempo de conteo. Descripción de los parámetros globales y de cada fase incluidos en el refinamiento. Control del refinamiento: factor de escala. Modelado del fondo. Corrimiento de cero. Refinamiento de parámetros estructurales. Modelado de la orientación preferencial. Interpretación de los factores de acuerdo. Criterios de ajuste. Varios ejemplos de aplicación y ejercitación: refinamiento de estructura cristalina, tamaño de cristalita y deformaciones por análisis del perfil de pico, análisis cuantitativo, etc. Se trabajará con el software libre FullProf Suite.

Análisis cuantitativo

Fundamentos del análisis cuantitativo de fases por difracción de rayos X. Factores que lo afectan: absorción, orientación preferencial, superposición de picos. Métodos que utilizan la Intensidad Integrada. Métodos que utilizan el perfil completo de difracción (Rietveld). Problemas comunes. Ejemplos de aplicación.

Análisis del ensanchamiento de pico: tamaño de cristalita y microdeformaciones

Influencia del tamaño de cristal finito en el ancho de los picos de Bragg: Ecuación de Scherrer. Influencia de las microdeformaciones. Método de Williamson-Hall. Funciones para el ajuste del perfil de los picos. Deconvolución del ancho debido a la muestra y el ancho instrumental. Patrones para la determinación del ancho instrumental. Empleo del método de Rietveld para el análisis de ensanchamiento de pico. Aplicaciones a nanomateriales. Ejemplos.

Aplicaciones avanzadas

Difracción de rayos X con incidencia rasante. Otras técnicas de rayos X que suelen estar asociadas a difractómetros de rayos X de polvos: reflectometría de rayos X (XRR) y dispersión de rayos X a bajo ángulo (SAXS). Difracción de rayos X con radicación sincrotrón. Otras técnicas.

4. METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA

Estrategias de enseñanza que se priorizarán en el dictado de la actividad (ej.: taller, exposición, aula invertida, dinámicas grupales, trabajos prácticos de laboratorio, trabajos de campo, etc.)

La modalidad de dictado será teórico-práctica. Se trabajará en clases expositivas brindando los fundamentos de cada tema y ejemplos de aplicación. Las actividades prácticas se desarrollarán en grupos reducidos para la resolución de ejercicios y el análisis de artículos científicos. Las actividades experimentales se organizarán con una discusión previa sobre los fundamentos teóricos y el desarrollo del trabajo experimental.

5. ACTIVIDADES

Diagrama de las actividades con indicación de la carga horaria estimada.

Clases teóricas: 4 clases de 2,5 horas. Total: 10 horas.

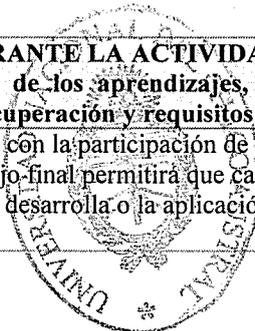
Clases teóricas-prácticas: 5 clases de 6 horas. Total: 30 horas.

Elaboración del Trabajo Final.

6. INSTANCIAS DE EVALUACIÓN DURANTE LA ACTIVIDAD

Detallar en qué consistirá la evaluación de los aprendizajes, cantidad y frecuencia de las evaluaciones, si se prevén instancias de recuperación y requisitos de aprobación de la actividad.

La evaluación se realizará de modo sumativo con la participación de los alumnos en las clases y en la producción de los trabajos prácticos. El trabajo final permitirá que cada alumno profundice la temática en relación con la investigación que desarrolla o la aplicación que tiene esta temática en su campo profesional.



Handwritten mark

7. CRONOGRAMA ESTIMATIVO

En este punto consignar cómo se distribuirán las horas de dictado de la actividad, en el tiempo de duración establecido. Se deberá consignar la fecha de los días de semana en que se dictará la actividad y la cantidad de horas por día, según los meses de duración.

Clases teóricas: 4 clases de 2,5 horas en la mañana martes 10/6 y 12/6 y jueves 12/6 y 19/6.

Clases teóricas-prácticas: 5 clases de 6 horas de trabajo los días lunes 23/6, martes 24/6, miércoles 25/6, jueves 26/6 y viernes 27/6.

8. MODALIDAD

Carácter presencial o a distancia.

Mixto, con clases presenciales en el laboratorio y a distancia mediante videoconferencia.

9. BIBLIOGRAFÍA

Enumerar los textos básicos que serán manejados total o parcialmente durante la actividad, que den cuenta del enfoque adoptado y su actualización.

C. Giacovazzo, Fundamentals of Crystallography, 3th Ed., IUCr Text on Crystallography, Oxford Science Publications, UK, 2011.

- H. P. Klug, L. E. Alexander, X-Ray Diffraction Procedures: For Polycrystalline and Amorphous Materials, John Wiley & Sons, New York, 1974.

- R. A. Young, The Rietveld Method, Oxford University Press, 1995.

- G. Margaritondo, Elements of Synchrotron Light, Oxford University Press, 2002.

- L.S. Dent Glasser, Symmetry.

10. REQUERIMIENTOS

Descripción de los recursos físicos, materiales y económicos necesarios para su realización, conforme el número de asistentes estimado.

La UNCAUS dispone de la infraestructura y equipamiento necesarios: aula híbrida, curso Moodle, laboratorio, materiales, reactivos y equipos (pH-metro, balanza, etc.) así como con un equipo de difracción de rayos X. Mediante el Programa de Doctorado (RESOL. 2023-329-APN-SECPU#ME y RESOL-2024-1388-APN-SE#MCH) se cubrirá la movilidad del Dr. Diego German Lamas desde Buenos Aires y se adquirirán los insumos para el desarrollo de los trabajos prácticos de laboratorio. El estipendio de los docentes está contemplado en el presupuesto del Programa antes citado.



Nora B. Okulik
Dra. Nora B. Okulik
Directora
Dpto. de Cs. Básicas y Aplicadas