

IX Escuela de la Asociación Argentina de Cristalografía

Curso I

Teoría, análisis de datos y aplicaciones. Dispersión a bajo ángulo y reflectometría de rayos X.

CONICET, Bahía Blanca, 6 a 10 de noviembre de 2017

Total: 40 horas

El Sistema Nacional de Rayos X dependiente de la **Secretaría de Articulación Científico Tecnológica (MINCyT)**, junto con **La Asociación Argentina de Cristalografía (AACr)** y **la Unión Internacional de Cristalografía (IUCr)**, convocan a participar del curso “Dispersión a bajo ángulo y reflectometría de rayos X”.

El curso forma parte de la **IX Escuela de la AACr** a realizarse en Bahía Blanca y será organizado por **UAT - CCT Conicet Bahía Blanca** y **Dpto de Química de la Universidad Nacional del Sur**.

Profesores:

- Aldo F. Craievich, Profesor Senior, Instituto de Física, Universidad de San Pablo, San Pablo-SP, Brasil
- Guinther Kellermann, Profesor Adjunto. Universidad Federal de Paraná, Curitiba – Pr, Brasil
- Marcelo Ceolin, Profesor de la Universidad Nacional de La Plata e Investigador del CONICET, La Plata.
- Andrés Zelcer, Investigador del CONICET, CNEA, Buenos Aires

Coordinación local: Dailoff, Marta (CCT CONICET Bahía Blanca, Argentina).

Objetivo: Serán presentadas las teorías básicas asociadas a los efectos de dispersión de rayos X a pequeños ángulos por transmisión (SAXS), SAXS anómalo (ASAXS), reflectometría de rayos X (XR) y SAXS en incidencia rasante (GISAXS). Estas técnicas experimentales son frecuentemente utilizadas para determinaciones de características estructurales relevantes de materiales en escala nanométrica. Los resultados de estos estudios permiten en muchos casos comprender las propiedades físicas y químicas de sistemas nanoestructurados, tales como los materiales formados por partículas coloidales en solución sólida o líquida, estructuras fractales, sistemas

nanoporosos, proteínas en solución, polímeros y cristales líquidos nanoestructurados, películas delgadas y superficies modificadas. Serán presentados y discutidos diversos ejemplos de aplicaciones en estudios de materiales orgánicos e inorgánicos, incluyendo resultados de investigaciones recientes. Habrá también clases dedicadas a descripciones de las instrumentaciones asociadas a los diferentes montajes experimentales y clases prácticas que incluirán la resolución de listas de ejercicios y el uso de programas básicos de análisis de datos experimentales.

Dirigido a:

Graduados universitarios de física, geología, arqueología, ingeniería, biología, química, bioquímica, agronomía u otra carrera que necesite de esta técnica para llevar a cabo trabajos de investigación.

CUPO: Cuarenta (40). Ocho (8) alumnos pertenecientes a universidades e instituciones educativas locales, dieciséis (16) pertenecientes a instituciones del resto del país y dieciséis (16) pertenecientes universidades extranjeras.

Nota: Si las ocho (8) vacantes para alumnos pertenecientes a universidades e instituciones públicas o privadas locales no fuesen cubiertas podrán cubrirse con alumnos del resto del país.

Se otorgarán ayudas económicas a los alumnos externos argentinos a través de SNRX y a los alumnos extranjeros a través de IUCr. De ser necesario se seleccionará a los postulantes cuyas tareas y responsabilidades por situación de revista estén más cerca de los objetivos del curso.

Inscripciones: Los alumnos interesados deberán llenar la planilla de inscripción que se encuentra en la pag. <http://www.aacr2017.bahiablanca-conicet.gob.ar/> y enviarla la dirección de mail de contacto aacr2017@bahiablanca-conicet.gob.ar asunto: Escuela:

Los alumnos inscriptos en la Escuela que soliciten una beca deberán enviar la siguiente información:

- planilla de inscripción,
- un Curriculum Vitae (2 páginas, pdf),
- los certificados analíticos de la carrera de grado y posgrado en curso (pdf),
- una carta de recomendación (pdf) de un profesor/investigador.

FECHA LÍMITE PARA POSTULARSE: **30 de agosto de 2017**. Se informará si están aceptados el día 10 de septiembre de 2017.

Programa:

I. Generadores clásicos de rayos X y fuentes de luz sincrotrón. Geometría de montajes experimentales para estudios de dispersión de rayos X a pequeños ángulos por transmisión (SAXS). Sistemas ópticos, detectores y accesorios para estudios experimentales in situ.

II. Teoría básica de SAXS clásico por transmisión. Sistemas de dos densidades electrónicas. Ley de Porod. Sistemas diluidos de nanopartículas. Ley de Guinier. Soluciones concentradas con correlación espacial. Sistemas fractales. Sistemas bicontínuos. Estructuras jerárquicas.

III. Procedimientos en experiencias de SAXS y tratamiento preliminar de curvas experimentales. Determinación de la atenuación de las muestras. Supresión de la dispersión parásita. Efectos de “smearing” en los resultados experimentales producidos por cámaras con haces de perfil lineal. Medición de la intensidad de dispersión a pequeños ángulos en escala absoluta. Resolución de ejercicios y análisis de datos referentes a sistemas particulados.

IV. Aplicaciones de SAXS en estudios de materiales nanoestructurados: Sistemas diluidos y monodispersos de nanopartículas esféricas, sistemas diluidos de nanopartículas esféricas polidispersas, sistemas diluidos de nanopartículas anisotrópicas, estructuras fractales, sistemas bicontinuos, nanoestructuras de tipo “core-shell” y proteínas en solución.

V. Aplicaciones de SAXS en estudios estructurales de sistemas de nanopartículas inorgánicas y de sistemas nanoporosos. Procesos de agregación en matrices sólidas y líquidas. Estudios in situ de procesos de formación de nanopartículas metálicas en matrices vítreas. Determinación de temperaturas de fusión y de cristalización de nanopartículas mediante el uso exclusivo de SAXS y mediante el uso combinado de SAXS y difracción de rayos X a altos ángulos.

VI. Conceptos básicos de la reflectometría de rayos X (XR). Ley de Snell. Partes real e imaginaria del índice de refracción. Ángulo crítico de reflexión total. Características generales de las curvas de XR correspondientes a materiales homogéneos de superficie exterior plana y de películas delgadas depositadas en substrato plano. Determinación del espesor, densidad másica media y rugosidades de películas delgadas. Instrumentación y geometría de montajes de XR. Resolución de ejercicios y uso de programa de análisis de datos experimentales.

VII. Conceptos básicos de la dispersión de rayos X en incidencia rasante (GISAXS). Aplicaciones de GISAXS al estudio de nanoestructuras superficiales y de películas delgadas nanoestructuradas. Ecuaciones generales de la intensidad de GISAXS. Ejemplos de aplicaciones de GISAXS. Análisis de datos experimentales.

VIII. Teoría básica de la dispersión de rayos X anómala o resonante (ASAXS). Aplicaciones de la técnica ASAXS al estudio de materiales con más de dos densidades electrónicas. Ejemplo de análisis de datos.

Bibliografía

- Small-Angle X-ray Scattering, *O. Glatter and O. Kratky*. Pergamon Press (1982).
- Neutron, X-ray and Light Scattering. *P. Lindner and T. Zemb* (Eds.), North Holland Amsterdam (1991).
- Small-angle X-ray scattering by nanostructured materials. *A.F. Craievich*. Handbook of Sol-Gel Science and Technology. Chapter 8. 2nd Edition. Springer Publishers (2016).