

# **PROGRAMA DE ACTUALIZACIÓN EN “CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL Y ANÁLISIS DE PROPIEDADES DE SÓLIDOS CRISTALINOS: POLIMORFOS, SOLVATOS, COCRISTALES Y SALES”**

## **I - FUNDAMENTOS DEL NUEVO PROGRAMA**

### **Generalidades**

La cristalografía, el crecimiento cristalino y las técnicas de caracterización de materiales cristalinos son una gran herramienta para los profesionales que se desempeñan en el sector productivo. Solo por citar algunas aplicaciones, la cristalografía se utiliza en la industria farmacéutica, cosmética, de cementos y cerámicos, petrolera, de pinturas y pigmentos, de polímeros y plásticos, y de alimentos, entre otras. El Programa de Actualización plantea cubrir los contenidos teórico-prácticos básicos vinculados al campo de la Ingeniería Cristalina necesarios para comprender los factores y procesos que intervienen en la síntesis, producción y caracterización de sólidos cristalinos. La Ingeniería Cristalina es una disciplina que alberga como principales intereses el diseño, la síntesis y la caracterización de estructuras cristalinas con propiedades específicas. Si bien el término ingeniería cristalina fue introducido por primera vez en 1971 por Schmidt en relación a las reacciones de fotodimerización entre fases cristalinas del ácido cinámico, la definición más moderna, abarcativa y a la que mayormente se recurre, es a la establecida por Desiraju, quien la describe como "el estudio de las interacciones intermoleculares en el contexto de empaquetamiento cristalino y luego, la aplicación de tal conocimiento en el diseño de nuevos sólidos con propiedades físicas y químicas deseadas". Dado que un buen orden molecular es un prerequisite esencial para diseñar prácticamente cualquier tipo de sistemas químicos, la ingeniería cristalina puede considerarse entonces, como la base para el desarrollo de materiales funcionalizados con diversas propiedades y aplicaciones, como superconductividad eléctrica, ferromagnetismo y otras. Esta emergente área se nutre también de la interdisciplina dado que es necesario recurrir a diferentes especialistas de distintos campos de la ciencia para abarcar el estudio de los aspectos químicos y físicos que dan lugar a los sistemas cristalinos y su caracterización.

Las técnicas instrumentales de caracterización de sistemas sólidos cristalinos más importantes son aquellas basadas en radiación de rayos X. Por ello, dentro de los temas que abarca el programa se encuentran los principios de la física de los rayos X y la difracción de rayos X. La cristalografía de moléculas pequeñas o cristalografía química, se refiere a la difracción de rayos X de monocristal para determinar de forma inequívoca la estructura tridimensional de las moléculas de bajo peso molecular. Por otro lado, la difracción de rayos X de polvos, es aquella que se aplica usualmente a material policristalino. Ambas técnicas implican el uso de cristalografía para estudiar los problemas que son principalmente de naturaleza química y proporciona mediciones exactas y precisas de los parámetros estructurales de una manera que ningún otro método puede hacerlo. Las mismas se pueden aplicar a compuestos de interés para la química, la biología, la fisicoquímica, la ciencia de materiales, la geología y la mineralogía, entre las más importantes. Los sistemas de estudio incluyen por ejemplo, nuevos productos químicos sintéticos (tanto inorgánicos, orgánicos o compuestos de coordinación y organometálicos), catalizadores, productos farmacéuticos, productos naturales y nuevos materiales. Los fundamentos y aplicaciones de estas técnicas serán cubiertos en el Programa, tanto de manera teórica como práctica. Otras técnicas instrumentales complementarias también incluidas en el Programa son las calorimetrías (DSC/TGA), resonancia magnética nuclear (RMN), espectroscopía infrarroja (IR), entre otras. También se incluyen fundamentos y aplicaciones de crecimiento cristalino en el

laboratorio, la adquisición de manualidades básicas para la manipulación de muestras cristalinas y la adquisición de datos experimentales por las técnicas instrumentales mencionadas.

Por otro lado, el Programa de Actualización incluye también crecimiento cristalino y cristalización. La cristalización es el proceso mediante el cual las moléculas se ordenan de un modo natural formando un retículo repetitivo que se denomina monocristal o cristal único. Los cristales son generados en la naturaleza y también artificialmente en el laboratorio. Los monocristales, junto con otras formas de materia condensada (cerámica, polímeros, cristales líquidos, etc.), son la base de la tecnología moderna. De esta forma, la investigación básica y la producción de nuevos materiales en estado sólido "diseñados a medida", con las propiedades físicas y químicas deseadas, no sólo requieren de la síntesis sino también de los procesos de obtención de monocristales. Por ello, la capacidad de generar cristales de alta calidad se ha convertido en un área en sí misma de la cristalografía. Durante el programa se aprenderá a: purificar las muestras a cristalizar, obtener monocristales aplicando diferentes técnicas de crecimiento cristalino, identificar variables del proceso y desarrollar protocolos de cristalización.

Finalmente, cabe destacar que las propiedades físicas y químicas de los compuestos en estado sólido pueden estar relacionadas al tipo de fase cristalina en la que se encuentre. Entre las formas cristalinas a las que se hace referencia, se destacan los polimorfos (el polimorfismo es un fenómeno por el cual un compuesto químico da lugar a más de una forma cristalina que mantienen la misma fórmula molecular pero diferente disposición tridimensional en el espacio, a cada una de ellas se las denomina polimorfos), los co-cristales (definidas como cristales moleculares de múltiples componentes), las sales y los solvatos o hidratos. En este sentido, estudiar la relación entre las propiedades observadas y las propiedades estructurales y el tipo de fase cristalina, es de gran interés para diferentes áreas de la ciencia y además, es de gran utilidad para varias industrias, como la farmacéutica, pigmentaria, alimenticia, etc. Por ejemplo, en el proceso de desarrollo de fármacos, conocer las propiedades en estado sólido en una etapa temprana del mismo, ayuda a evitar problemas de manufactura, permite modificar y entender el rendimiento de las drogas y brinda la posibilidad de innovación. En este sentido, durante el Programa de Actualización se darán las herramientas necesarias para llevar adelante:

- Búsqueda de fases cristalinas
  - Identificación de las condiciones en las que se obtienen determinados polimorfos y otras formas cristalinas.
  - Determinación de las propiedades de cada forma cristalina utilizando diferentes técnicas instrumentales según requerimiento.
- Identificación de fases cristalinas
  - Identificación de las diferentes fases cristalinas en una determinada muestra.
  - Realizar estudios estructurales y de propiedades de las diferentes fases cristalinas utilizando diferentes técnicas instrumentales según requerimiento.
- Estudios de Estabilidad de las Fases Cristalinas
  - Obtener un conocimiento detallado de la estabilidad de diferentes formas cristalinas y su interrelación.
- Identificar e investigar los procesos por los cuales es posible obtener las diferentes fases cristalinas
  - Explorar los procesos relacionados al crecimiento cristalino vinculado a la obtención de cada una de las fases cristalinas (polimorfos, co-cristales, sales y solvatos).

En resumen, el Programa de Actualización en “**Caracterización Estructural y Análisis de Propiedades de Sólidos Cristalinos**”, tiene el objeto de dotar a los técnicos, profesionales e investigadores tanto del ámbito académico como del sector productivo con las herramientas necesarias para comprender los fenómenos y las técnicas analíticas utilizadas en el estudio de los sistemas sólidos cristalinos. Por la relevancia de la temática, el programa será de interés de una gran variedad de ramas de la química. Al adquirir los conocimientos que se impartirán en el programa se garantizará una mejora en relación a la pureza cristalina tanto de los intermediarios como de los productos finales en procesos relacionados a la producción de material cristalino. Este último aspecto es muy crucial dado que las propiedades químicas y físicas del material sólido cristalino se relacionan con el tipo de fase y pureza.

### **Palabras claves**

*Sólidos cristalinos, cristalografía, difracción de rayos X de polvos, difracción de rayos X de monocristal, polimorfismo, co-cristales, sales, solvatos e hidratos*

## **II - OBJETIVOS DEL PROGRAMA**

### **Objetivos generales**

Ofrecer una formación en el campo de la Ingeniería Cristalina para el conocimiento de los factores y procesos que intervienen en la síntesis, producción y caracterización de sólidos cristalinos.

### **Objetivos específicos**

- Dotar a los asistentes de los conocimientos y herramientas básicas requeridas para la obtención y caracterización de sólidos cristalinos
- Que el asistente adquiera conocimientos básicos sobre cristalografía y difracción de rayos X.
- Introducir al asistente en la problemática de la obtención de cristales, obtención de datos de difracción de rayos X, determinación estructural a través de resolución y posterior refinamiento de datos cristalográficos.
- Que el asistente adquiera los conocimientos teórico-prácticos básicos de técnicas instrumentales de caracterización de sólidos cristalinos complementarias a la difracción de rayos X.
- Lograr que los participantes sean capaces de comprender la relación entre la estructura y las propiedades de los sólidos cristalinos.

## **III - SEDE ACADÉMICA DEL PROGRAMA DE ACTUALIZACIÓN**

El Programa será desarrollado en la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires supervisado a nivel de la Secretaría de Posgrado. Su actividad se enmarca en la Res. CS 5918/2012 de UBA, que rige las normas a tener en cuenta para las Carreras de Especialización y Programas de Actualización.

#### **IV - REQUISITOS DE ADMISIÓN**

Los aspirantes a ser admitidos en el Programa de Actualización en Caracterización Estructural y Análisis de Propiedades de Sólidos Cristalinos deberán ser:

- Profesionales y técnicos miembros de laboratorios de control de calidad, de análisis industriales, de investigación y desarrollo
- Estudiantes de postgrado que posean título de grado de Licenciatura en ciencias químicas, biológicas y geológicas, farmacéutico, bioquímico, u otras afines.

#### **V - DISEÑO CURRICULAR DEL PROGRAMA**

El Programa de Actualización se compone de 4 (cuatro) módulos teórico práctico, que podrán cursarse en forma independiente salvo el primer módulo que será de carácter obligatorio para ser considerado alumno del programa y luego deberán respetarse algunas correlatividades. La carga horaria total del Programa de Actualización es de 132 horas presenciales, más las horas que a cada participante le lleve redactar los documentos pertinentes de evaluación. El régimen de cursada será de una jornada semanal de 4 horas de duración.

Los módulos mencionados son los siguientes:

1. Estructura molecular. Tipos de sólidos. Interacciones intermoleculares. Redes cristalinas, elementos y operaciones de simetría en sólidos cristalinos.
2. Obtención y análisis estructural de sólidos cristalinos: Cristalización y Crecimiento cristalino. Propiedades diferenciales de los sólidos cristalinos: Ingeniería Cristalina de Polimorfos, Solvatos, Cocristales y Sales.
3. Técnicas de caracterización de sólidos cristalinos I: Difracción de Rayos X
4. Técnicas de caracterización de sólidos cristalinos II: Técnicas Calorimétricas, Espectroscopia Infrarroja, Raman, RMN.  
Regulación y patentamiento de sólidos cristalinos.

#### **VI - SISTEMA DE EVALUACION, CALIFICACION Y CERTIFICACION DEL MÓDULO**

Al finalizar cada Módulo se tomará un examen que será calificado en una escala de 0 a 10. La modalidad del examen dependerá del módulo y podrá ser: entrega de trabajos prácticos finales individuales, presentaciones orales y/o exámenes escritos presenciales.

La Facultad de Ciencias Exactas y Naturales otorgará el Certificado de Aprobación de Programa de Actualización en Caracterización Estructural y Análisis de Propiedades de Sólidos Cristalinos cuando el alumno haya aprobado todos los Módulos dictados en el marco del Programa de Actualización con calificación no inferior a 7 puntos y haya abonado los aranceles correspondientes.

La nota final de aprobación del Programa de Actualización será el promedio de las notas obtenidas en los módulos aprobados y constará en el Certificado que la Facultad emita. En el caso de los Módulos por separado se emitirá un certificado de asistencia o aprobación según corresponda. La aprobación del Módulo 1 es un requisito obligatorio para obtener el certificado de asistencia o aprobación de los Módulos 2 a 4 de forma parcial.

## VII - ARANCELES

La Facultad de Cs. Exactas y Naturales fijará los aranceles oportunamente, los cuales serán comunicados públicamente en la convocatoria de inscripción. Constarán de una suma fija por matrícula y una cuota mensual por las clases dictadas. Existirán en principio aranceles diferenciados para participantes del sector público, del sector privado, para alumnos de postgrado de la FCEN y para alumnos de postgrado de otras facultades de UUNN. Se efectuará un descuento del 20% por pago total adelantado del conjunto de cuatro módulos que conforman el Programa. Los aranceles del Módulo serán propuestos por el Coordinador del Módulo y el Secretario de Posgrado, y aprobados particularmente por el Consejo Directivo, en acuerdo con normas vigentes. Podrán ser eventualmente modificados por el mismo luego del primer dictado, por razones justificadas, a la solicitud de la Secretaría de Posgrado.

Aranceles tentativos para el año 2018\*

- Alumnos de postgrado de la FCEN, UBA: sin costo
- Participantes del sector público y alumnos de postgrado de otras facultades de UUNN: Matrícula \$300 y 8 cuotas mensuales de \$1200
- Participantes del sector privado y otros: Matrícula \$600 y 8 cuotas mensuales de \$2400

\* Los mismos pueden sufrir modificaciones y serán comunicados públicamente en la convocatoria de inscripción

## VIII - INFORMES E INSCRIPCIÓN:

Subsecretaría de Posgrado de la FCEyN – Planta Baja Pabellón II,  
Ciudad Universitaria (1428) Bs. As.

Horario de Atención: lunes a viernes de 10 a 13 y de 14 a 19 hs. Teléfono: 5285 - 8056

[postgrado@de.fcen.uba.ar](mailto:postgrado@de.fcen.uba.ar) ; [solidoscristalinos@qi.fcen.uba.ar](mailto:solidoscristalinos@qi.fcen.uba.ar)

Página web: [solidoscristalinos.qi.fcen.uba.ar](http://solidoscristalinos.qi.fcen.uba.ar)

Preinscripción informal de Diciembre a Febrero: <https://goo.gl/forms/uSSbcO8hER4zC82V2>