

**Planeación del curso de Difracción de rayos X.
Clave de la uea 2141134**

Profesor: Federico González García, Cub. T-205, correo electrónico. fedegonzalez@gmail.com

Página web educativa: <http://sgpwe.izt.uam.mx/Profesor/405-Federico-Gonzalez.html>

Horario: Teoría (3h) y práctica (3h) martes y jueves de 11:00 h a 14:00 h.

Horario de asesoría: lunes de 11:00 a 12:00 h.

Contenido del curso

Objetivos

Objetivo General:

Que al final de la UEA el alumno sea capaz de:

Aplicar el fundamento físico de una de las técnicas más usadas para caracterizar materiales cristalinos e interpretar un gráfico de difracción para determinar el tamaño y la forma de la celda unidad que presenta un sólido cristalino dado.

Objetivos Específicos:

Que al final de la UEA el alumno sea capaz de:

- Identificar los planos que poseen las celdas unidad de diferentes tipos de red de Bravais.
- Determinar el espaciamiento-d de los grupos de planos que conforman el cristal.
- Asignar los Índices de Miller a diferentes conjuntos de planos.
- Comprender las implicaciones de la Ley de Bragg: para identificar la posición angular de los picos difractados y así determinar cual plano (con los índices de Miller apropiados) produce un pico de difracción dado.
- Saber que la presencia de un pico de difracción (predicho por la ley de Bragg) está gobernada por reglas simples.
- Conocer aspectos elementales de difracción de rayos X de cristal.
- Conocer la diferencia entre difracción de rayos X de Polvos y difracción de rayos X de Cristal.

Temario

1. Planos de red. Índices de Miller y direcciones: Fórmula del espaciamiento interplanar (espaciamiento-d). Planos de red y espaciamientos-d. Espaciamiento interplanar y volumen de las celdas unidad.
2. Difracción de la radiación electromagnética: Interferencia constructiva y destructiva de ondas.
3. Generación de rayo X: Radiación $K\beta$, $K\alpha_1$ y $K\alpha_2$. Tubo de rayos X de filamento. Longitudes de onda de rayos X de los materiales tarjeta más usados.
4. Difracción de la luz por medio de una rejilla óptica: Interferencia constructiva (reforzamiento) e interferencia destructiva (cancelación)
5. Cristales y difracción de rayos X: La ecuación de Laue. Ley de Bragg. Multiplicidades. El experimento de difracción de rayos X.
6. El método de polvos: Principios y usos. Técnicas modernas de rayos X de polvos: Difractómetros de polvos. Cámaras de enfoque de Guinier. Mediciones de patrones de polvos y comparación de difracción con los métodos de film: Espaciamiento-d. Intensidades. Forma de los picos (perfiles de línea).

7. Difracción de polvos a altas temperaturas. Efecto del tamaño del cristal en los patrones de polvos: Medida del tamaño de partícula. Efecto de la deformación de los cristales en los máximos de difracción de un patrón de polvos.
8. Refinamiento de los parámetros de la celda Unidad e indexación de patrones de polvos.
9. Fuentes de radiación de fondo (Fluorescencia).
10. Un patrón de polvos es una huella digital de un cristal. Patrones de polvos calculados a partir de los datos de la estructura del cristal.
11. Influencia de la simetría de cristal y multiplicidades en los patrones de polvos. Patrones de polvos de fases mezcladas.
12. Rayos X de cristal: Grupos puntuales. Grupos espaciales. Estructura cristalina.
13. Métodos de cristal simple: Principios y usos. Intensidades. Dispersión de rayos X por un átomo. Dispersión de rayo X por un cristal. Intensidades: Fórmula general.
14. Cálculo del modelo para CaF_2 . Factores que afectan las intensidades. Factores-R. Determinación de la estructura. Mapas de densidad electrónica.

Modalidades de conducción del proceso de enseñanza-aprendizaje

1. Clase de teoría en forma de conferencia magistral.
2. Clases en forma de taller individual o por equipo de alumnos.
3. Se recomienda que sean dos sesiones de 3 horas por semana: Una sesión de 3 h para teoría y una sesión de 3 h para prácticas.
4. Se entenderá por sesión de prácticas aquella en la que los alumnos realizarán experimentos de rayos X, interpretaran los gráficos de difracción obtenidos en el laboratorio o resolverán ejercicios relacionados, bajo la asesoría del profesor.
5. Se procurará que el alumno desarrolle la capacidad de trabajar en equipo.

Modalidades de evaluación.

Evaluación Global:

Sesión de Teoría: Será el promedio ponderado de las evaluaciones periódicas como exámenes (dos al menos) y tareas que en conjunto representarán el 70% de la calificación y, a juicio del profesor una evaluación terminal.

Sesión de Prácticas: Se evaluarán los resultados del laboratorio por medio de un informe escrito de las actividades prácticas y experimentales y se considerará el desempeño del alumno en el laboratorio (30%).

La equivalencia alfanumérica para la asignación de la calificación final del curso, una vez ponderados los elementos anteriores, será la siguiente: [0-6.0) = **NA**; [6.0-7.5) = **S**; [7.5-8.6) = **B**; [8.6-10.0] = **MB**

Bibliografía.

1. Barret, C. R.; Nix, W. D.; Tetelman, A. S. The Principles of Engineering Materials; Prentice-Hall: New Jersey, 1973.
2. Cotton F. A. Chemical Applications of Group Theory; 3th edition, Wiley-Interscience: New York 1990.
3. Cullity, B. D. Elements of X-Ray Diffraction; 2th edition, Addison-Wesley: USA, 1978.
4. Jenkins, R.; Snyder, R. L. Introduction to X-ray Powder Diffractometry; John-Wiley & Sons: New York, 1996.
5. West, A. R. Solid State Chemistry and its Applications; John-Wiley & Sons: New York, 1984.
6. West, A. R. Basic Solid State Chemistry; 2th edition, John-Wiley & Sons: New York, 1999.