

DIFRACCIÓN

8 CRÉDITOS

OBJETIVO

Establecer los principios fundamentales del fenómeno de difracción, haciendo énfasis en las características principales, geométricas y de simetría, de redes cristalinas. Discutir sus alcances como técnica de investigación en ciencia e ingeniería de materiales, especialmente en materiales cristalinos.

TEMARIO

1. Principios básicos de interacción de radiación con la materia: (14 horas)
 - 1.1. Naturaleza y producción de rayos X.
 - 1.2. Difracción de rayos X y de electrones:
 - 1.2.1. Dispersión de Thompson.
 - 1.2.2. Dispersión por electrones atómicos y por átomos individuales.
 - 1.2.3. Difracción por cristales.
 - 1.2.4. Análisis geométrico.
 - 1.3. La ley de Bragg.
 - 1.4. Condiciones de Laue.
 - 1.5. Esfera de reflexión.
 - 1.6. El espacio recíproco.
 - 1.7. Simetrías en el espacio recíproco.
 - 1.8. La ley de Friedel.
 - 1.9. Ausencias sistemáticas.
 - 1.10. Intensidades de difracción y detección de la radiación.
 - 1.11. Factores que efectúan la intensidad de difracción:
 - 1.11.1 Factor de polarización.
 - 1.11.2. Factor de temperatura.
 - 1.11.3. Factor de dispersión atómica.
 - 1.11.4. Factor de estructura.
2. Estructura de la materia: (8 horas)
 - 2.1. Índices de Miller.
 - 2.2. Sistemas cristalinos.
 - 2.3. Redes de Brabais.
 - 2.4. Defectos.
3. Métodos experimentales de difracción de rayos X. (30 horas)
 - 3.1. Identificación del sólido.
 - 3.2. Archivos PDF (Powder Diffraction File) y JCPDS (Joint Committee of Powder Diffraction Standards).
 - 3.3. Parámetros de red.
 - 3.4. Polimorfos.

- 3.5.Orden-desorden.
- 3.6.Tamaño de cristal.
- 3.7. Esfuerzos.
- 3.8.Termodifracción.
- 3.9.Materiales no-cristalinos.

4. Programas de computación para difracción de rayos X: (12 horas)

- 4.1. PowderCell.
- 4.2. Rietveld.
- 4.3. FullProf.
- 4.4. Topas.
- 4.5. Genaral Structure Analysis System (GSAS).

BIBLIOGRAFÍA

Texto a seguir en el curso:

Cullity B. D., *Elements of X-Ray Diffraction*, Addison-Wesley, Mass., 1956.

Básica:

1. Giacovazzo C., Monaco H.L., Viterbo D., Scordari F., Gilli G., Zanotti G., Catti M., *Fundamentals of Crystallography*, Oxford University Press, 1992.
2. Cowley J. M., *Diffraction Physics*, North Holland, 1975.
3. Wormald J., *Diffraction Methods*, Claredon Press, 1973.
4. Wilson A. J. C., *Elements of X-Ray Crystallography*, Addison Wesley, 1970.
5. Ladd M. F. C. and Palmer R.A., *Structure Determination by X-ray Crystallography*, Plenum Press, 1978.
6. Klug H. P. and Alexander L. E., *X-Ray Diffraction Procedures (for Polycrystalline and Amorphous Materials)*, John Wiley and Sons, N.Y., 1974.
7. Azároff L.V., *Elements of X-Ray Diffraction*, McGraw Hill, N.Y., 1974.

Consulta:

1. Forwood C. T. and Larebrough L.M.C., *Electron Microscopy of Interfaces in Metals and Alloys*, Ed. Adam Hilger, 1991.
2. Bertin E.P., *Principles and Practice of X-Ray Spectrometric Analysis*, Plenum Press., N. Y., 1975.
3. León López E.G., *Física de los Cristales*, Limusa, México, 1984.
4. Jenkins R. and De Vries L., *Practical X-Ray Spectroscopy 2*, McMillan, LTD London, 1973.
5. Bermúdez J., *Teoría y Práctica de la Espectroscopía de Rayos -X*, Exedra, México, 1975.
6. Alexander L.E., *X-Ray Diffraction Methods in Polymer Science*, Wiley, N.Y., 1970.

7. Bonse, B., *Characterization of Crystal Defects by X-Ray Methods*, Plenum, N.Y., 1980.
8. Bloss F. D., *Crystallography and Crystall Chemistry. An Introduction*, Holt, Rinchart and Winston, Inc., 1971.
9. Buerger M. J., *Elementary Crystallography an Introduction to the Fundamental Geometrical Features of Crystals*, John Wiley and Sons, Inc. N.Y., 1956.
10. West A. R., *Basic solid state chemistry*, John Wiley and sons, Nueva York (1988).
11. Baños L., *Preparación de especímenes para análisis por: difracción de rayos X y fluorescencia de rayos X* La ciencia de materiales y su impacto en la arqueología, editado por D. Mendoza, E. L. Brito, J. A. Arenas, Innovación Editorial Lagares de México, Naucalpan, México (2004).
12. Besoain E., *Mineralogía de arcillas de suelos*, Instituto interamericano de cooperación para la agricultura, Serie de libros y materiales educativos #60, San José, Costa Rica (1985).
13. Brown G., *X-ray identification and crystal structures of clay minerals*, 2nd Ed., Mineralogical Society, Londres (1961).
14. Fuentes Cobas L., *Introducción al método de Rietveld*, Escuela en Ciencia e Ingeniería de Materiales, 21-25 de junio de 2004, publicado por Sociedad Mexicana de Cristalográfia A. C., México D.F., (2004).
15. Guinebretière R., *X-ray diffraction by polycrystalline materials*, ISTE Ltd, Londres, (2007).
16. Guinier A., *Théorie et technique de la radiocristallographie*, Dunod, Paris, (1964).
17. Moore D. M., Reynolds, Jr R. C., *X-ray diffraction and the identification and analysis of clay minerals*, Oxford University Press, Oxford (1989).
18. Van Meerssche M., Feneau-Dupont J., *Introduction à la Cristallographie et à la Chimie Structurale*, Vander éditeur, Lovaina (1973).
19. Warren B. E., *X-ray diffraction*, Addison-Wesley publishing company, Reading Massachussets (1969).