ESTRUCTURA DE LOS MATERIALES

12 CREDITOS

OBJETIVOS

En este curso se presentan los conceptos básicos sobre estructura cristalina y difracción de rayos-X necesarios para el estudio de los materiales, con el fin de que los alumnos de diversas disciplinas como física, ingeniería, química y otras áreas afines puedan adquirir los conocimientos indispensables para incursionar en la síntesis y análisis de la estructura de los materiales. Esta asignatura tiene una orientación teórica y requiere que el alumno dedique de 10 a 12 horas de trabajo individual.

TEMARIO

1. ESTRUCTURA CRISTALINA (30 horas)

1.1. Introducción

- El estado cristalino, ¿qué es un cristal? Postulado de la red cristalina. Monocristales y policristales
- Base y red de traslación. Vectores reticulares
- Celdas elementales y primitivas. Sistemas cristalinos. Redes de Bravais
- Centralizaciones

1.2. Elementos de cristalografía

- Planos y direcciones cristalinas. Índices de Miller
- La red recíproca. Vectores recíprocos. Fórmulas básicas que relacionan el espacio recíproco con el espacio real
- Volumen de la celda. Densidad. Distancias y ángulos interplanares
- Cambio de sistema de referencia, matrices de transformación
- Proyección estereográfica. Redes de Wulff

1.3. Estructuras Cristalinas

- Posiciones atómicas. Representaciones de Wyckoff. Coordinación. Número de coordinación. Poliedros de coordinación
- Algunos tipos importantes de estructuras de sólidos inorgánicos. Estructuras *sc*, *bcc*, *fcc*. Estructuras tipo diamante, cinc blende, perovskita. (cloruro de cesio, sal de roca, blenda antifluorita, wurtzita, arseniuro de níquel, rutilo, titanato de bario, espinela (directa e inversa), olivina, diamante y grafito)
- Algunos tipos importantes de estructuras de sólidos orgánicos: poli(etileno), acetilenos, poli(etilentereftalato), nylon
- El sistema hexagonal. Índices de Miller-Bravais. Transformación romboédricohexagonal
- Empaquetamientos: *hcp* y *ccp*. Factores de empaquetamiento. Sitios cristalográficos: tetraédricos y octaédricos

!.4. Defectos cristalinos

- Defectos puntuales. Defectos lineales. Dislocaciones

- Compuestos estequiométricos y no estequiométricos

2. SIMETRIA CRISTALINA (30 horas)

2.1. Operaciones de simetría
- Definición. Traslación, reflexión, rotación, inversión. Representación matricial.
- Operaciones abiertas y cerradas.
- Grupo espacial, grupo factor y grupo puntual. Definiciones.

2.2. Grupos puntuales
- Grupos puntuales y propiedades físicas.
- Grupos cíclicos.
- Grupos diédricos.
- Grupos tetraédricos y octaédricos.
- Los 32 grupos puntuales. Clases de Laue.
- Simetría molecular.

3.3. Grupos espaciales
- Clasificación de los grupos espaciales. Grupos simórficos y no simórficos.
- Nomenclatura y simbología. Planos de deslizamiento, ejes helicoidales.
- Las tablas internacionales de cristalografía.

3. DIFRACCION DE RAYOS-X. (18 horas)

3.1. Introducción
- Naturaleza y propiedades de los rayos-x. Producción de rayos-x. Características espectrales. Longitudes de onda características.

3.2. Geometría de la difracción
- Ecuaciones de Laue. La ley de Bragg
- Red recíproca, la esfera de Ewald y las zonas de Brillouin
- Métodos de difracción. La cámara de Laue del cristal rotatorio
- Métodos de polvo. Cámara de Debye-Sherrer. Geometría Bragg-Bretano
- Direcciones de difracción

3.3. Intensidad de los picos de difracción
- Dispersión por un electrón, por un átomo, y por el cristal.
- El factor de estructura. El problema de la fase.
- Cálculo del factor de estructura en casos simples (estructuras con uno o dos átomos por celda en sistemas de alta simetría). Extinciones.
- El factor de Lorentz-polarización.
- El factor multiplicidad.
- Factores de absorción y temperatura.
- La intensidad integral. El patrón de difracción de un material

3.4. Difracción de rayos x, neutrones y electrones

- Aplicaciones.

4. ESTADOS CONDENSADOS. (6 horas)
    - Estados mesomórficos.
    - Estados vítreo, elastomérico y líquido.

5. CASOS PRÁCTICOS (12 horas)
    - Determinación del grupo espacial de simetría de un compuesto.
    - Indexación de patrones de difracción y las extinciones sistemáticas.
    - Determinación de microdeformaciones de un material a partir del ancho de los picos de difracción.
    - Determinación del tensor de esfuerzos y las constantes elásticas de un material, basado en la difracción.

BIBLIOGRAFÍA

1. Burns G. and Glazer A.M., *Space Groups for Solid State Scientists*, Academic Press, 1990.
2. Giacovazzo C., Monaco H.L., Viterbo D., Scordari F., Gilli G., Zanotti G., Catti M., *Fundamentals of Crystallography*, Oxford University Press, 1992.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

1. Pecharsky V. K. and Zavalij P. Y., *Fundamentals of Powder Diffration and Structural Characterization of Materials*, Springer Science+Business Media Inc., NY, USA, 2005.
2. West A. R., *Solid State Chemistry and its Applications*, Wiley, 2000.
3. Ladd M.F.C and Palmer R.A., Structure Determination by X-ray Cristallography, Plenum Press, New York, 1993.
4. Cowley J., *Electron Diffraction Techniques*, Oxford Science Pub., 1992.
5. Jackson A. G., *Handbook of Crystallography*., Springer-Verlag, New York, 1991.
6. Hyde B. G., *Inorganic Crystal Structure*,. Wiley and Sons, 1989.
7. Glazer A.M., Hilger A., *The Structure of Crystals*, England, 1987.
8. Cullity B. D., *Elements of X-Ray Diffraction*, 1978.
9 Wyckoff R.W., *Crystal Structures*, 2nd. Edition, Interscience Pub., 1966.
10. *International Tables of Crystallografy*, Volume A, IUCr, Springer.

International Tables for Crystallography ,Volume A: Space-group symmetry, International Union of Crystallography. Springer.