



UNIVERSIDAD SIMÓN BOLÍVAR
Vicerrectorado Académico

1. Departamento: **FÍSICA**

2. Asignatura: Cristalografía y Difracción de Rayos X

3. Código de la asignatura: **FS-5731**

No. de unidades-crédito: **3**

No. de horas semanales: Teoría 3 Práctica Laboratorio

4. Fecha de entrada en vigencia de este programa: Enero 2010

5. Requisitos: *(códigos) Física Moderna 3412 y Permiso Coordinación.*

6. OBJETIVO GENERAL:

Reconocer estructuras cristalinas y los elementos de simetría que la componen y ser capaz de simular su espectro de difracción a ángulo grande.

7. OBJETIVOS ESPECÍFICOS:

- ❖ Conocer los grupos espaciales que caracterizan una estructura cristalina.
- ❖ Manejar los elementos de simetría de los grupos espaciales.
- ❖ Dominar la producción de rayos x y sus características
- ❖ Comprender la interacción de Rayos x con los electrones de la Materia
- ❖ Poder calcular el patrón de difracción a ángulo grande producido por un compuesto dado.
- ❖ Aprender a montar muestras y a leer espectros de difracción
- ❖ Determinar parámetros de red cristalina con precisión a partir del patrón de difracción.
- ❖ Familiarizarse con los programas existentes para indicar y encontrar la estructura de una sustancia
- ❖ Saber identificar sustancias o mezclas con la ayuda de la Base de datos PDF2.

8. CONTENIDOS:

PARTE TEORICA

I ESTRUCTURAS CRISTALINAS

Arreglos triperiódicos de átomos
Base de una estructura
Redes de Bravais
Planos Reticulares
Indices planares
Estructuras simples
Ejemplos de metales y minerales
Ejemplos de sólidos amorfos

II.- RAYOS X y SU INTERACCION CON LA MATERIA

Producción de Rayos X
Absorción de Rayos X por la materia
Daños por irradiación

III.- RED RECÍPROCA Y DIFRACCION

Scattering por el electrón libre
Interferencia de ondas
Atomo con Z electrones
Difracción por un cristal
Ley de Bragg
Análisis de Fourier
Red Recíproca de una red cristalina
Factor de difusión atómica
Factor de estructura
Quasicristales

IV.- DIFRACCION A ANGULO GRANDE

Difracción por materiales cristalinos
Intensidad de los picos de difracción
Correcciones por Absorción, Factor de Lorentz
Factor de multiplicidad
Factor de temperatura
Difracción por materiales desordenados

V.- TECNICAS EXPERIMENTALES e INSTRUMENTACION

Técnicas fotográficas Debye Scherrer
Difratómetro de un eje
Monocromadores de Rayos X

VI.- APLICACIONES

Determinación de grados de cristalinidad
Identificación de minerales
Procesos de cristalización
Análisis cuantitativo de compuestos
Estudio de transiciones de fase
Determinación de Estructuras

PARTE PRÁCTICA

- 1.- Determinación de parámetros de redes cúbicas con Diagramas de Debye-Scherrer
- 2.- Identificación de fases con el Difratómetro

9. ESTRATEGIAS METODOLÓGICAS, DIDACTICAS O DE DESARROLLO DE LA ASIGNATURA:

Se recomiendan las siguientes estrategias metodológicas:

1. Clases magistrales
2. Sesiones de Ejercicios y/o Problemas
3. Práctica de Laboratorio (2)

10. ESTRATEGIAS DE EVALUACIÓN:

Se recomiendan las siguientes estrategias de evaluación:

1. Tareas cada 10 días
2. Presentación final por parte de cada estudiante
3. Participación activa de los estudiantes en el desarrollo de clases
4. Mini-Proyecto individual que resume lo estudiado
5. 2 Informes de las Prácticas realizadas

11. FUENTES DE INFORMACIÓN:

Fundamentals of Crystallography, C. Giacovazzo, Int. Union of Crystallography, Oxford Univ. Press (2002)

X-Ray Diffraction Procedures, H. Klug and L. Alexander, Wiley, New York (1970)

X-Ray Diffraction Methods in Polymer Science, L. Alexander, Wiley, New York, (1975)

Introduction to Solid State Physics, C. Kittel, Wiley, New York, (1996)

X-Ray scattering of Synthetic Polymers, F. J. Baltá-Calleja, C.G. Vonk, Elsevier, Amsterdam (1989)

X-Ray Diffraction in Crystals, Imperfect crystals and amorphous bodies, A. Guinier, Dover (1994).