

**Universidad de La Habana**  
**Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales**

**Maestría en Ciencia y Tecnología de Materiales**

<b>Curso de Postgrado</b> Introducción a la Difracción de Rayos X	<b>Total de Horas:</b> 192 <b>Créditos:</b> 4	<b>Tipo de curso:</b> Fundamental <u>x</u> Específico ____ Carácter: Obligatoria <u>x</u> para Doctorado Opcional <u>x</u> para Maestría
<b>Profesor</b> Dr. Aberlio Pentón Madrigal y Dr. Ernesto Estévez Rams		
<b>Objetivo general</b> Formar al profesional en el conocimiento de la teoría cinemática de a difracción de rayos x, sus aplicaciones y limitaciones para el estudio de la estructura de sustancias cristalinas.		
<b>Contenidos (temas)</b> 1. Fundamentos de cristalografía. 1.1 Fundamentos del estado cristalino. Nociones de cristalografía. 1.2 Operaciones de simetría y elementos de simetría. 1.3 Grupos espaciales cristalográficos. Red recíproca. 1.4 Tabla Internacional de Cristalografía (Vol. A).  2. Fundamentos de la difracción de rayos – X 2.1 Introducción. Naturaleza y propiedades de los RX, producción de RX, espectro continuo y característico. Detección de rayos – X. 2.2 Fenómeno de la difracción de RX (punto de vista geométrico). Ley de Bragg y esfera de Edwald. 2.3 Teoría cinemática de la difracción. Origen de un patrón de difracción de polvos. Posición de los picos, forma de los perfiles de los picos e intensidad de los picos de difracción. 2.4 Técnicas experimentales. Introducción. Difractómetro de polvos. Preparación de muestras. 2.5 Adquisición de datos experimentales. Evaluación de la calidad de datos experimentales. 2.6 Procesamiento preliminar de datos. Análisis de fases. Bases de datos cristalográficas. 2.7 indizado manual y automatico de patrones de difraccion. Uso de softwares. 2.8 Determinación precisa de parámetros de la red. Método de mínimos cuadrados. Trabajo con ejemplos. 2.9 Caracterización de la microestructura cristalina de materiales. Determinación de tamaños de granos y tensiones residuales no homogéneas. Método de Williamsom-Hall. Trabajo con ejemplos. 2.10 Introducción al método de Rietveld. Trabajo con ejemplos		
<b>Objetivos específicos</b> (habilidades a adquirir por parte de los estudiantes) Que el estudiante conozca los fundamentos de la cristalografía y concepto de estructura cristalina.  Que el estudiante conozca los fundamentos de la metodología de trabajo con el fenómeno de difracción de rayos x, para el estudio de la estructura cristalina.  Que el estudiante conozca las características de los rayos x, su origen y su interacción con las sustancias.  Que el estudiante conozca la teoría cinemática de a difracción de rayos x, sus aplicaciones y limitaciones para el estudio de la estructura de sustancias cristalinas.  Que el estudiante conozca las aplicaciones fundamentales de los rayos x en el estudio de los sólidos y particularmente de las sustancias cristalinas y ejercite la interpretación de los resultados de algunas técnicas importantes.		

**Bibliografía fundamental**

1. X-Ray Diffraction. B.E. Warren. Ed Addison Wesley. 1990
2. International Tables for Crystallography. Vol. A. Ed Theo Hahn (Reidel Publishing Company). Edit.: International Union of Crystallography, Holland, 1985.
3. Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials by Vitalij K. Pecharsky and Peter Y. Zavalij. Springer Verlag 2003.
4. Crystal Structures . Ralph W.G. Wyckoff. Ed Interscience. Edit.: Robert E. Krieger, Florida, 1969.
5. Crystallography by Walter Borchardt Springer Verlag. 1995.
6. Fundamentals of Crystallography edited by C.Giacovazzo, Oxford University Press, 1992.
7. Data bases “Powder Diffraction Files” (PDF), “Inorganic Crystal Structure Database” (ICSD) 2008 and Crystallographic Open Database (COD).
8. Program Fullprof by J. Rodriguez Carvajal, CEA-CNRS. Saclay, France <http://www.ill.eu/sites/fullprof/>.
9. The Rietveld Method Edited by R. A. Young, IUCr, Oxford Science Publications 1993.

**Sistema de evaluación**

- Examen (escrito y oral).
- Trabajo de curso

**Formas de enseñanza**

- Conferencias (predomina la exposición del profesor),
- Clases Prácticas (prevalece la elaboración conjunta profesor-estudiantes de las soluciones a los problemas)
- Seminarios (predomina la participación de los estudiantes)

Actualizado

Dr. Ernesto Estévez Rams

Octubre/2015