

Universidad de La Habana
Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales

| | | |
|---|---|--|
| Curso de Postgrado Métodos avanzados de Cristalografía y Análisis Estructural | Total de Horas:150 Créditos: 3 | Tipo de curso: Fundamental Específico <u>X</u> Carácter: Obligatoria _ Opcional <u>x</u> |
| Profesor Ernesto Estevez Rams | | |
| Objetivo general <ul style="list-style-type: none">• Que el estudiante aprenda los fundamentos matemáticos de la cristalografía incluyendo nanocristalografía y materiales comprometidos cristalográficamente y su elucidación por técnicas avanzadas de difracción de rayos X con énfasis en el análisis cuantitativo microestructural. | | |

Contenidos (temas)

1) Introduccion a la cristalografia matematica

Delta de Dirac y función selectora.

La red cristalina

Algebra cristalográfica

Elementos de teoría de grupos

Simetria puntual y grupos puntuales

Transformaciones afines e isometrías

Espacio reciproco

Grupos espaciales

Simetria en el espacio reciproco

2) Fundamentos matematicos de la difraccion

Transformada de Fourier. Convolucion.

Difraccion y esfera de Ewald

El problema de las fases

Simetria y difracción

Proyeccion estereográfica

Ecuacion de Debye

Difraccion de polvos

3) Metodos experimentales de difraccion

Instrumentos de difraccion y Sistema optico.

Instrumentos de laboratorio y fuentes sincrotrón

Interaccion de la radiación con la materia.

Contribucion instrumental al perfil de difracción

Deconvolucion de perfiles de difracción.

Aboradje del instrumento por parámetros fundamentales.

4) Perfiles de difraccion

Caracterizando perfiles de difraccion:

Intensidad integrada, FWHM, ancho integral, asimetria.

Perfiles analíticos:

Lorentziana, Gaussiana, Voigt, PVoigt, Pearson.

Tratando la asimetria.

Perfiles no analiticos

Diseño de experimentos para muestras comprometidas cristalograficamente.

Reduccion de data.

Modelaje complete del patron

5) Analisis de Tamano y forma de cristalita.

Ecuaciones de difracción para el cristal finito

Ecuacion de Scherrer, limitaciones.

Ecuacion modificada de Scherrer. Limitaciones

Grafico de Williamson Hall.

Metodos modernos de analisis de tamano y forma. El concepto de fantasma.

Metodos computacionales de analisis de tamano y forma.

6) Defectos puntuales

Ecuacion de difraccion para defectos puntuales y lineales.

Vacancias y desorden composicional

Aproximacion moderna al analisis de defectos puntuales

Metodos computacionales.

Objetivos específicos (habilidades a adquirir por parte de los estudiantes)

- Entender la definición matemática de red cristalina, espacio vectorial cristalino. Ser capaz de realizar cálculos cristalográficos complejos. Ser capaz de distinguir entre red cristalina y cristal.
- Entender la definición matemática de simetría y su uso en cristalografía. Poder trabajar con la teoría de grupo para demostraciones sencillas de combinación de simetrías.
- Entender el concepto de red recíproca. Ser capaz de realizar cálculos en la red recíproca. Entender la relación entre red recíproca y red directa.
- Entender los fundamentos matemáticos de la difracción. Ser capaz de construir la esfera de Ewald para situaciones experimentales reales. Lograr interpretar los experimentos de difracción a partir de su realización matemática.
- Entender la ecuación de Debye y su aplicabilidad.
- Entender la proyección estereográfica y su uso en cristalografía. Poder realizar la proyección estereográfica para sistemas sencillos y complejos.
- Entender el fenómeno físico de la difracción. Conocer los diferentes instrumentos de difracción y su uso.
- Lograr describir los perfiles de difracción usando expresiones analíticas y no analíticas. Saber extraer los parámetros de un pico de difracción. Ser capaz de diseñar experimentos de difracción no convencionales.
- Que el estudiante sea capaz de separar las diferentes contribuciones al perfil de difracción.
- Que el estudiante sea capaz de determinar el tamaño de cristalita por difracción de rayos X. Que el estudiante sea capaz de entender las limitaciones de los diferentes métodos.
- Que el estudiante sea capaz de analizar defectos puntuales, lineales, planares en muestras. Que el estudiante sea capaz de elaborar modelos de defectos para el análisis de materiales.
- Que el estudiante sea capaz de analizar deformaciones y tensiones en materiales por difracción de rayos X de manera cualitativa y cuantitativa.
- Que el estudiante logre entender los modelos en uso para describir nanocristales. Que el estudiante sea capaz de diseñar experimentos de difracción en muestras nanocristalinas así como reducir e interpretar la data de dichos experimentos.

Bibliografía fundamental

- Modern Crystallography. B. K. Vainshtein.
- Diffraction physics. J. M. Cowley.
- Fundamentals of Crystallography. C. Giacovazzo.
- Diffraction Analysis of the microstructure of Materials. Mittemaijer & P. Scardi.

Bibliografía complementaria

- Geometric crystallography. P. Engel.
- International Tables for Crystallography. IUCr.

Sistema de evaluación (el profesor debe conformar lo que mejor conviene, según particularidades de la asignatura)

- Dos seminarios evaluativos
- Examen intrasemestral
- Trabajo de curso
- Examen final

Formas de enseñanza

- Conferencias
- Clases Prácticas
- Seminarios
- Laboratorios

Elaborado por: Ernesto Estevez Rams
IMRE-Facultad de Fisica
e-mail: estevez@imre.oc.uh.cu

Fecha: Octubre/2014