



## Maestría en Tecnología Avanzada / CICATA-IPN Unidad Legaria

### Objetivo:

Proporcionar a los estudiantes los fundamentos de las técnicas de difracción y sus aplicaciones a la Caracterización de Materiales.

### Temas:

1: Introducción a la Cristalografía.  
Estructura de sólidos. Relación entre estructuras cristalina y electrónica. Número de coordinación y orbitales atómicos. Celda unitaria. Redes de Bravais. Grupos puntuales y grupos espaciales. Cristales ideales y cristales reales. Monocristales y policristales. Nomenclatura en Cristalografía. Tablas Internacionales. Bases de Datos.

2: Dispersión de rayos X por cristales.  
Propiedades de rayos X y de cristales. Difracción de rayos X. Ley de Bragg. Ecuaciones de Laue. Espacio Inverso y el patrón de difracción. Métodos de difracción. Método de Laue y método de polvo. Intensidad del haz difractado. Dispersión de rayos X por un electrón, un átomo y un cristal. Factor de estructura. Factor de multiplicidad. Factores de Lorentz, de absorción y de temperatura.

3: Cristales Reales y el Haz Difractado.  
Tamaño de cristalita y coherencia del haz difractado. Tensiones en la red y ensanchamiento del pico. Como extraer información estructural del fondo. Bajo orden cristalino y materiales amorfos.

4: Instrumentación para Difracción de Rayos X.  
Producción de rayos X. Fuentes convencionales y de sincrotrón. Óptica de rayos X y Detectores. Métodos fotográficos y difractométricos. Diferentes configuraciones fuente-muestra-detector.

5: Análisis Cualitativo y Cuantitativo de Fases.  
Celda unitaria y asignación de índices de Miller. Análisis cualitativo de fases. Análisis cuantitativo de fases: Estándar interno y externo. El método de Rietveld.

6: Resolución y Refinamiento de Estructuras Cristalinas a partir de Patrones de Polvo.

Ajuste del Perfil y descomposición del patrón. Grupos espaciales y reglas de extinción. Métodos de Patterson y Métodos Directos. Refinamiento Rietveld y su validación.

7: Resolución y Refinamiento de Estructuras Cristalinas a partir de Difracción en Monocristales.  
El patrón de difracción y el espacio inverso. Métodos del Espacio Directo. Métodos del Espacio Inverso: Función de Patterson, Métodos Directos. Síntesis de Fourier. Refinamiento estructural. Figuras de Mérito.

8: Difracción de Neutrones y de Electrones.  
Interacción de neutrones con la sustancia. Características de la difracción de neutrones. Aplicaciones. Difracción de electrones y sus aplicaciones. Comparación de las técnicas de difracción.

### Evaluación:

Dos evaluaciones escritas, después del Tópico 3 y al Final del Curso. Una presentación oral al final del Curso sobre aplicación de las Técnicas de Difracción a su Proyecto de Tesis.

### Bibliografía:

1. B. D. Cullity, Elements of X-Ray Diffraction, Addison-Wesley Publishing Company, Inc. (2008)
2. Donald E. Sands, Introduction to Crystallography, W. A. Benjamin (1978)
3. B. E. Warren, *X-Ray Diffraction*, Dover Publications, Inc., USA 1990.
4. Ralph W. G. Wyckoff, *Crystal structures*, Inorganic compounds (2<sup>a</sup> Ed), Robert E. Krieger, USA 1986.
5. Harold P. Klug & Leroy E. Alexander, *X-Ray Diffraction Procedures*, John Wiley & Sons
6. Robert A. Young, *The Rietveld Method*, Oxford University (1993)
7. C. Giacovazzo, et al, *Fundamentals of Crystallography*, Oxford University (2009)