



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL
SECRETARIA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO
DIRECCIÓN DE POSGRADO

FORMATO GUÍA PARA REGISTRO DE ASIGNATURAS

Hoja 1 de 3

I. DATOS DEL PROGRAMA Y LA ASIGNATURA

1.1 NOMBRE DEL PROGRAMA: Maestría en Tecnología Avanzada
Doctorado en Tecnología Avanzada

1.2 COORDINADOR DEL PROGRAMA: Dr. Fernando Trejo Zarraga

1.3 NOMBRE DE LA ASIGNATURA: Propiedades Estructurales de Cristales y Materiales Policristalinos

1.4 CLAVE: 3455 (Para ser llenado por la SIP)

1.5 TIPO DE ASIGNATURA: OBLIGATORIA OPTATIVA
 SEMINARIO ESTANCIA

1.6 NÚMERO DE HORAS: TEORÍA PRACTICA T-P

1.7 UNIDADES DE CRÉDITO:

1.8 FECHA DE LA ELABORACIÓN DEL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA:

13	05	05
d	m	a

1.9 SESIÓN DEL COLEGIO DE PROFESORES EN QUE SE ACORDÓ LA IMPLANTACIÓN DE LA ASIGNATURA:

SESIÓN No.	
------------	--

FECHA:	02	06	05
	d	m	a

1.10 FECHA DE REGISTRO EN SIP:

d	M	a

 (Para ser llenado por la SIP)

II. DATOS DEL PERSONAL ACADÉMICO

2.1 COORD. ASIGNATURA: Dr. Edilso Reguera Ruiz CLAVE: 4929-EB-07

2.2 PROF. PARTICIPANTE: Dr. Martín Zapata Torres CLAVE: 6786-ED-10
Dr. Miguel Ángel Aguilar Frutis CLAVE: 6299-ED-09

III. DESCRIPCIÓN DEL CONTENIDO DEL PROGRAMA DE LA ASIGNATURA

III.1 OBJETIVO GENERAL:

El objetivo del curso es que el estudiante se apropie de los fundamentos de las técnicas de difracción para el estudio estructural de materiales. Esto incluye dominar los fundamentos físicos de la difracción de rayos X, de neutrones y de electrones por un cristal, el alcance y limitaciones de cada una de ellas, y que aprenda a aplicarlas para resolver problemas concretos de su Proyecto de Tesis y posteriormente en su práctica profesional.

III.2 DESCRIPCIÓN DEL CONTENIDO

TEMAS Y SUBTEMAS	TIEMPO (Semanas)
<p>Tema 1: Breve Introducción a la Cristalografía.</p> <p>1.1. El átomo y su estructura electrónica. Empaquetamiento compacto. Estructura cristalina. Relación entre estructura cristalina y estructura electrónica. Número de coordinación y configuración de los orbitales del átomo en el sólido.</p> <p>1.2. Concepto de celda unitaria. Tipos de celdas y celdas de Bravais. Planos y Direcciones en un Cristal. Operaciones de simetría. Concepto de grupos puntuales y grupos espaciales de simetría.</p> <p>1.3. Cristal perfecto y Cristales reales. Monocristales y policristales.</p> <p>1.4. Nomenclatura en Cristalografía. Diferentes simbologías y representaciones. Las Tablas Internacionales de Cristalografía.</p> <p>1.5. Bases de datos sobre Cristalografía: Materiales Orgánicos y Materiales Inorgánicos.</p>	2
<p>Tema 2: Dispersión de rayos X por un Cristal</p> <p>2.1. Propiedades de los rayos X y propiedades de los cristales. El fenómeno de difracción.</p> <p>2.2. La Ley de Bragg. Ecuaciones de Laue. Red recíproca y patrón de difracción.</p> <p>2.3. Métodos de difracción: Método de Laue y Método de polvos. Diferencias y particularidades.</p> <p>2.4. Intensidad de las líneas de difracción. Dispersión de los rayos X por un electrón. Dispersión por un átomo. Dispersión por la celda unitaria. Factor de Estructura.</p> <p>2.5. Factor de multiplicidad. Factor de Lorentz. Factor de absorción. Factor de temperatura.</p> <p>2.6. Intensidades difractadas y espacio recíproco. Coeficientes de extinción.</p>	2
<p>Tema 3: Cristales reales y factores que alteran el haz difractado</p> <p>3.1. Tamaño de cristalitas y pérdida de coherencia en el haz difractado.</p> <p>3.2. Tensiones en la red. Efecto combinado de tensiones y tamaño de cristalita.</p> <p>3.3. El fondo del patrón de difracción en policristales. Extracción de información estructural a partir del fondo.</p> <p>3.4. Baja cristalinidad y materiales amorfos.</p> <p>3.5. Aplicaciones prácticas en materiales reales y nanoestructuras.</p>	2

<p>Tema 4: Instrumentación para difracción de rayos X.</p> <p>4.1. Generación de un haz de rayos apropiado para el experimento de difracción. El tubo convencional. La aceleración de cargas en un sincrotrón.</p> <p>4.2. Óptica de rayos X. Espejos de Göbel. Monocromadores.</p> <p>4.3. Detectores de rayos X. Detector proporcional. Detector Geiger. Detector de centelleo. Detector semiconductor. Sistemas CDD y detector de área.</p> <p>4.4. Sistemas criogénicos y de alta temperatura para difracción de rayos X</p> <p>4.5. Métodos para registrar el patrón de difracción. Método fotográfico y método difractométrico.</p> <p>4.6. Configuraciones fuente-muestra-detector en el experimento de difracción.</p>	<p>2</p>
<p>Tema 5: Análisis cualitativo y cuantitativo de fases por difracción de rayos X.</p> <p>5.1. El patrón de difracción: La huella digital de un cristal.</p> <p>5.2. Asignación de índices de Miller a un patrón de difracción. Diferentes algoritmos disponibles y figuras de mérito.</p> <p>5.3. Análisis cualitativos de fases: Identificación de diferentes fases en una mezcla policristalina real. Estrategias a emplear.</p> <p>5.4. Análisis cuantitativo de fases. Método del estándar externo y del estándar interno. Simulación del patrón de difracción y determinación de la composición de fases con ayuda del Método de Rietveld.</p> <p>5.5. Aplicaciones del análisis cualitativo y cuantitativo de fases en Ciencia de Materiales.</p>	<p>2</p>
<p>Tema 6: Resolución y Refinamiento de Estructuras Cristalinas a partir del patrón de difracción de policristales.</p> <p>6.1. Conceptos de Resolución y Refinamiento de una estructura cristalina.</p> <p>6.2. Identificación de la celda unitaria y del grupo espacial con ayuda de las extinciones.</p> <p>6.3. Ajuste de perfil y descomposición del patrón de difracción. El Método de Le Bail. .</p> <p>6.4. Selección de los modelos estructurales a refinar. Incorporación de información “a priori” y ligaduras a imponer al proceso de refinamiento. Métodos de Patterson y métodos directos.</p> <p>6.5. El Método de Rietveld. Interpretación y validación de resultados.</p> <p>6.6. Aplicación del Método de Rietveld a materiales reales. Ejemplos.</p>	<p>4</p>

<p>Tema 7: Resolución y Refinamiento de Estructuras Cristalinas a partir del patrón de difracción de monocristales.</p> <p>7.1. El patrón de difracción: imagen del cristal en el espacio recíproco.</p> <p>7.2. Métodos en el espacio directo: Ensayo y error. Método de Montecarlo y recocido simulado (simulation annealing). Ejemplos. Programas (softwares) disponibles y como y cuando emplearlos.</p> <p>7.3. Métodos en el espacio recíproco: Métodos de átomo pesado, función de Patterson, reemplazo isomorfo. Métodos directos: multi-solución y adición simbólica. Programas (softwares) disponibles y cómo y cuándo emplearlos.</p> <p>7.4. Métodos de Fourier: Cálculo de la densidad electrónica, síntesis de Fourier, síntesis de diferencias de Fourier.</p> <p>7.5. Refinamiento de estructuras: Fundamento del método de los mínimos cuadrados multiparamétrico. Aplicaciones a datos de mono-cristales. Programas (softwares) disponibles y cómo y cuándo emplearlos.</p> <p>7.6. Criterios para evaluar la calidad de los datos y de los resultados. Figuras de Mérito.</p> <p>7.7. Manejo de las bases de datos en Cristalografía. Como preparar y depositar archivos en las bases de datos.</p>	<p>4</p>
<p>Tema 8: Difracción de neutrones y difracción de electrones</p> <p>8.1 Propiedades de los neutrones. Sección eficaz de interacción de los neutrones con la sustancia.</p> <p>8.2. Difracción de neutrones por un cristal. Particularidades. Red cristalina y sub-red magnética.</p> <p>8.3. Ventajas y desventajas de la difracción de neutrones respecto a los rayos X. Identificación de átomos ligeros (H).</p> <p>8.4. Difracción de electrones. Efectos cinéticos y efectos dinámicos durante la dispersión de electrones por un cristal.</p> <p>8.5. Difracción de área seleccionada en un microscopio electrónico. Aplicaciones en Nanotecnologías</p> <p>8.6. Complementación de la difracción de rayos X(fotones), electrones (una partícula cargada) y neutrones (partícula sin carga pero con espín).</p>	<p>2</p>

III.3 BIBLIOGRAFIA UTILIZADA EN LA ASIGNATURA

BIBLIOGRAFÍA

1. B. D. Cullity, Elements of X-Ray Diffraction, Addison-Wesley Publishing Company, Inc.
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 (2ª Ed), Robert E. Krieger, USA 1986.
5. Theo Hahn, *International tables for Crystallography* (Vol. 4) Space Group Symmetry; Internactional Union of Crystallography, 1989
6. Harold P. Klug & Leroy E. Alexander, *X-Ray Diffraction Procedures*, John Wiley & Sons
7. Robert A. Young, *The Rietveld Method*, Oxford University (1993)
8. C. Giacovazzo, et al, *Fundamentals of Crystallography*, Oxford University (1992)
9. Richard J. D. Tilley, *Crystals and Crystal Structures*, John Wiley & Sons (2006)
10. Neutrons and Synchrotron Radiation in Engineering Materials Science: From Fundamentals to Material and Component Characterization, Walter Reimers, VCH, 2004
11. Electron Diffraction in the Transmission Electron Microscope, P.E. Champness, IUCr, 205

III.4 PROCEDIMIENTOS O INSTRUMENTOS DE EVALUACIÓN A UTILIZAR

- 1) Exposición oral (ppt) de 20 minutos por parte de los estudiantes en el aula sobre los contenidos de cada unidad y la aplicación práctica de esos contenidos y discusión en el colectivo. Expondrían la 3ra parte del grupo. En total cada estudiante haría 2 exposiciones de este tipo en el Semestre.
- 2) Evaluación escrita inter-semestral, al concluir el Tema 3, y al final del Semestre.
- 3) Exposición oral (ppt) de 20 minutos al concluir el curso acerca de cómo se aplicarían los contenidos de este a su Proyecto de Tesis. Para todos los estudiantes.