

## **CM5206 Cristalografía y Difracción de Rayos- X**

10 UDS

Requisitos: CM4202

Fundamentos y aplicaciones.

Docentes: María Teresa Garland y Andrés Ibañez

### **Objetivos:**

Que el estudiante adquiera conocimientos básicos sobre cristalografía y difracción de rayos X.

Introducir al estudiante en la resolución y refinamiento de estructuras cristalinas, según el interés particular de cada uno de ellos, despertando su particular interés por esta área de la ciencia.

### **Metodología de enseñanza:**

La materia contará con tres modalidades de clases complementarias: teóricas, prácticas y laboratorios.

Las clases teóricas, tienen como objetivo transmitir los conocimientos a los estudiantes, se expondrán y desarrollarán los fundamentos de los diferentes temas contenidos en el programa. Las clases contarán con ejemplos concretos para su mayor comprensión y algunas experiencias demostrativas.

Las clases prácticas tienen como objetivo permitir la apropiación de los conocimientos adquiridos, en ellas se expondrán ejemplos y ejercicios. Por otra parte serán un espacio de trabajo para que los estudiantes ejerciten y puedan enfrentarse a diferentes problemas, muchos de ellos de su propio interés, consultando dudas para generar un espacio de discusión.

Las clases de laboratorio tienen como objetivo familiarizar a los estudiantes con el instrumental utilizado en difracción de rayos X, la toma de datos, evaluación de resultados y el uso del conjunto de programas y bases de datos necesarios para enfrentar la resolución de un problema desde un punto de vista cristalográfico. En estas clases, se dará preferencia a temas propuestos por los alumnos, si los tienen, que tendrán la responsabilidad de llevar a cabo su resolución hasta la instancia final que permitan los datos y técnicas elegidos (A nivel de publicación en una revista de la especialidad).

### **Régimen de promoción:**

Los contenidos de las unidades 1 y 2 serán iguales para todos los estudiantes y serán evaluados a través de examen final y aplicados a ejercicios semanales con nota..

Los contenidos de las unidades 3, 4 y 5 serán evaluados por el desempeño del estudiante en esta actividad y por la exposición oral de los resultados alcanzados.

## Contenidos:

### **Unidad 1: Cristalografía**

#### **El estado cristalino.**

*Naturaleza de las fuerzas interatómicas, distancias interatómicas, ideas empíricas del radio iónico, poliedros de coordinación, valencia electrostática, las ideas de Born, uniones covalentes.*

#### **Redes y Celdas Elementales**

*Redes, vectores translación, redes centradas, parámetros de red, celdas elementales, celda reducida (Niggli), simetría de redes, coordenadas atómica, ejemplos de estructuras simples: cobre, hierro, magnesio.*

#### **Direcciones y Planos cristalográficos.**

*Idea intuitiva a partir de la forma externa cristalina, planos cristalinos, ley de los índices racionales, índices de Miller, direcciones, ejes de zona, familias de planos y el espaciado interplanar: índices de Bragg, la red recíproca y algunas de sus propiedades.*

#### **Elementos y Operaciones de simetría puntuales**

*Elementos de simetría puntual: centro de inversión, plano especular, ejes de rotación, ejes de inversión, notación, combinación de elementos, los grupos puntuales, aplicaciones a los poliedros de coordinación (tetraedro, octaedro y cubo) y moléculas simples (benceno y metano).*

#### **Elementos y Operaciones de simetría cristalinos**

*Elementos de simetría con traslación, restricciones, planos con deslizamiento, ejes roto-translacionales, el plano con deslizamiento "d", redes de Bravais, sistemas cristalinos, grupos espaciales, representación, símbolos y notación, lectura de tablas e interpretación, la unidad asimétrica, relación entre  $V$ ,  $Z$  y  $\rho$ , derivación de las coordenadas atómicas, las posiciones especiales, ejemplos y aplicaciones.*

#### **Transformaciones geométricas**

*Cambios de origen, cambios de celda, cambios de coordenadas producidas por cambios de celda, cambios en los vectores recíprocos y en los índices, cambios en los símbolos de la red y del grupo espacial, ejemplos). Sub- y super- redes, maclas. Tensor métrico, cálculos usuales, ejemplos.*

#### **Aplicaciones**

*Estructuras de óxidos sencillas: perovskita y cristobalita. Transiciones de fases en estructuras perovskitas. Puentes hidrógeno (importancia de las interacciones débiles), Ejemplo  $\text{KH}_2\text{PO}_4$  y sus transiciones de fases.*

### **Unidad 2: Difracción**

#### **Conceptos matemáticos útiles**

*Función  $\delta$  de Dirac, función de red, transformada de Fourier (ejemplos), producto de convolución (ejemplos).*

#### **Fuentes de radiación**

*Generación de rayos X, espectro discreto y continuo, fenómeno de absorción y filtros, generadores de tubo sellado y ánodo rotatorio, sincrotron. Otras fuentes: electrones y neutrones.*

#### **Dispersión (Scattering) de ondas**

*Interferencia entre ondas (dispersión coherente e incoherente), redes de difracción, difracción por un cristal, enfoque de Bragg y Laue-Ewald, factor de forma atómico, factor de estructura, dispersión anómala, la re-aparición de la red recíproca, simetrías en la distribución de intensidades: grupos de Laue.*

#### **La experiencia de difracción por material cristalino**

*Difracción por muestras mono y poli-cristalinas, técnicas experimentales e instrumentos usuales, ventajas comparativas de cada método, factor de Lorenz-polarización, el problema de las fases: relación entre factor de estructura e intensidad, relación entre fases y coordenadas atómicas, cálculo de densidad electrónica.*

#### **Cristales reales**

*Efectos térmicos: factor de Debye-Waller, fenómeno de extinción primaria y secundaria, simetrías en la distribución de intensidades: regla de Friedel, pares de Viguet, aplicaciones en la determinación de la estructura absoluta.*

### **Unidad 3: Resolución de estructuras cristalinas**

#### **Métodos en el espacio recíproco**

*Métodos de átomo pesado, función de Patterson, reemplazo isomorfo.*

*Métodos directos: multisolución y adición simbólica*

#### **Métodos de Fourier**

*Cálculo de la densidad electrónica, síntesis de Fourier, síntesis de Fourier diferencias.*

### **Unidad 4: Refinamiento de estructuras cristalinas**

#### **Teoría de Cuadrados Mínimos**

**Aplicación a monocristales**

**Aplicación a policristales (Método de Rietveld)**

### **Unidad 5:**

**Elaboración de un paper a partir**

**de un cristal entregado por el Laboratorio.**