

INTRODUCCIÓN A LA DIFRACCIÓN DE RAYOS X

Juan Gabriel Ramírez

NOMBRE DEL CURSO: Introducción a la Difracción de Rayos X

CÓDIGO DEL CURSO: FISI 3763 (3 cred.); FISI 4763 (4 cred.)

UNIDAD ACADÉMICA: Departamento de Física

PERIODO ACADÉMICO: 201910

HORARIO: Ma y Mi, 9:30 - 10:50 pm

CO-REQUISITO: Estado Sólido (FISI 3760)

NOMBRE PROFESOR(A) PRINCIPAL: Juan Gabriel Ramírez

CORREO ELECTRÓNICO: jgramirez@uniandes.edu.co

HORARIO Y LUGAR DE ATENCIÓN: IP-303, en cualquier momento.

I Introducción

Difracción de rayos X (XRD) es una técnica analítica muy importante para investigadores en áreas relacionadas a ciencia de materiales. Este curso pretende dar a los estudiantes suficientes herramientas matemáticas y experimentales en el análisis de patrones de difracción de una gran variedad de sustancias (polvos, películas delgadas, nanopartículas, composites, etc.). Algunos de los temas a cubrir son: Propiedades de los rayos x, cristalografía, geometría de la difracción, ley de Bragg, geometría de cristales y teoría de grupos, materiales amorfos, medidas de parámetros de red, determinación de diagramas de fase y análisis cuantitativo de muestras con múltiples fases. Después de este curso, los estudiantes deben ser competentes en la determinación de fases estructurales en una gran variedad de muestras al tiempo de reconocer los diferentes montajes experimentales existentes y las normas de seguridad asociadas a ellos.

II Objetivos

Los objetivos principales del curso son:

- Ofrecer una visión general de los fundamentos físicos de la difracción de rayos x y su importancia en la ciencia de materiales.
- Determinar parámetros estructurales a partir de difractogramas.
- Mostrar las principales diferencias entre difractogramas entre diferentes tipos de muestras.

III Competencias a desarrollar

Al finalizar el curso, se espera que el estudiante esté en capacidad de:

- Entender el funcionamiento general de un difractómetro de rayos x.
- Determinar fases cristalográficas de forma cuantitativa.
- Determinar estrés estructural de materiales epitaxiales a partir de datos experimentales.
- Entender las relaciones de simetría entre cristales y su importancia en las propiedades físicas de materiales.
- Construir y analizar mapas recíprocos y polares.
- Realizar y analizar medidas de reflectometría para la determinación de espesores de capas delgadas.

IV Contenido por semanas

Parte 1: Propiedades de los rayos X

- Semana 1.** Introducción al curso, Propiedades de los rayos X. Radiación electromagnética, espectro característico, absorción.
- Semana 2.** Producción de rayos X, Detectores.
- Semana 3.** Geometría de cristales: Principios de simetría, sistemas cristalinos, estructura, defectos y proyección estereográfica.
- Semana 4.** Difracción (Geometría): Ley de Bragg, ecuaciones de Laue, red recíproca, espectroscopia con rayos X, métodos de difracción.
- Semana 5.** Difracción (Intensidades): Dispersión por electrones, átomos y cristales, Cálculo de factores de forma, aplicaciones a difracción poli-cristalina, factor de temperatura, ejemplos en la determinación del tamaño cristalino y tensión y estrés.
- Semana 6.** Medidas de difracción: Óptica de rayos x, detectores, monocromadores, fotografías de rayos x de polvos, fotografías Laue.
- Semana 7.** Identificación de fases por difracción, Determinación de la estructura cristalina, análisis cuantitativo de fases y medición de parámetros cristalinos.
- Semana 8.** Determinación de estrés mediante difracción.
- Semana 9. Primer Examen,** Inicio de proyecto final, métodos computacionales.

Parte 2: Temas avanzados (Tentativo)

- Semana 10.** Análisis Rietveld, y dispersión de rayos x a bajo (SAXS) y alto (WAXS) ángulo.
- Semana 11.** Función de distribución de pares, geometría de difracción para películas delgadas.
- Semana 12.** Difracción de hetero-estructuras en 2D.
- Semana 13.** Generación de mapas recíprocos, difracción en el plano y figuras polares.
- Semana 14.** Radiación en sincrotrón y aceleradores lineales, otras fuentes luminosas, generación de rayos x pulsados en escalas de femtosegundos.
- Semana 15.** Presentación de trabajos finales.

V Metodología

La metodología del curso consta principalmente de clases teóricas acompañadas de talleres semanales que pretenden desarrollar las habilidades algebraicas necesarias para realizar cálculos teóricos (40 %). A mitad del curso, se hará un examen sobre los conceptos básicos de difracción de rayos x y fundamentos físicos de las técnicas experimentales (30 %). Se darán lecturas adicionales, en especial artículos científicos recientes, con la idea de familiarizar a los estudiantes con temas actuales. Los estudiantes seleccionarán un proyecto de nivel avanzado (FISI-4763) o intermedio (FISI-3763), con componentes experimental y/o teórico-numérico, sobre el cual presentarán una exposición final (30 %). Las clases se combinarán con sesiones experimentales en el laboratorio de difracción de rayos x, recientemente adquirido por la Facultad de Ciencias.

VI Criterios de evaluación

Examen semana 8: 30 %

Problemas semanales (10 talleres): 40 %

Proyecto final: 30 %

VII Posibles proyectos

- Análisis de tamaño en nanopartículas de óxidos funcionales usando SAXS y WAXS en función de la temperatura.
- Análisis de composición y fases cristalinas en polvos.
- Análisis de la rugosidad interfacial en multicapas magnéticas usando reflectometría.
- Medición de mapas recíprocos y figuras polares en función de la temperatura en películas delgadas de óxidos funcionales.
- Determinación de la transición estructural en nanopartículas de BiFeO₃ mediante difracción en polvos hasta 1000 °C.
- Difracción de mono-cristales o proteínas.
- Determinación química mediante fluorescencia de rayos X.

VIII Bibliografía

Bibliografía principal:

- B.D.Cullity, *Elements of X-Ray Diffraction*, Third Edition, Addison Wesley Publishing Company, Inc., Reading, 2004. (Biblioteca General - 539.7222 C843 2001)

Bibliografía complementaria:

- Michael M. Woolfson, *An Introduction to X-ray Crystallography 2nd Edition*, (Biblioteca General - 548.83 W554)
- Leonid V. Azároff, *Elements of x-ray crystallography*. (Biblioteca General - 548.83 A916)
- Ron Jenkins y Robert Snyder, *Introduction to X-Ray Powder Diffractometry 1st Edition*, (Biblioteca General - 548.83 J254 y como recurso electrónico)
- Philip Willmott, *An Introduction to Synchrotron Radiation: Techniques and Applications*. (Biblioteca General - Recurso electrónico)
- Bob B. He *Two-dimensional X-ray diffraction*, (Biblioteca General - 548.83 H215)