

3 F 88

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO : de Física

ASIGNATURA: DIFRACCION DE RAYOS X Y DE ELECTRONES POR CRISTALES REALES.

CARRERA/S: Doctorado en Cs. Físicas

CARACTER: Optativo.

ORIENTACION:

PLAN:

DURACION DE LA MATERIA: 1(un) cuatrimestre

HORAS DE CLASE:	a) Teóricas..... ⁵	hs.	b) Problemas..... ²	hs.
	c) Laboratorio.....	hs.	d) Seminarios.....	hs.
			e) Totales..... ⁷	hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS:

Parte A

TEORIA

1. Introducción

Concepto de red cristalina. Indices de Miller. Red recíproca, concepto elemental. Análisis de redes recíprocas planas. Ley de Bragg y su expresión en términos del vector del espacio recíproco. Expresión de la diferencia de fase entre centros difusores en función del vector S. Amplitud resultante para centros difusores discretos y distribuciones continuas de la materia. Factor de scattering atómico. Su interpretación como transformada de Fourier de la densidad electrónica. Obtención de la expresión general de la intensidad difractada por centros discretos y por distribuciones continuas. Análisis de un par de centros difusores, casos particulares y expresión general en función del vector S. Análisis de la evolución de la forma del espacio recíproco cuando una distribución lineal regular se transforma en una distribución plana periódica y una distribución espacial periódica. Cálculo del número de pares difractantes en una cadena lineal, en una red plana y en una red espacial.

2. Teoría general de difracción por un cuerpo de estructura arbitraria

Expresión de la intensidad por un objeto homogéneo e infinito. Función de distribución. Caso finito. Propiedades de la función de forma y de su transformada de Fourier. Fórmula de Debye para centros difusores discretos de distribución arbitraria. Función distribución para materiales amorfos.

aprobado por Resolución 0512/88

3. Red recíproca de una red cristalina

Construcción de la red recíproca de un cristal perfecto en función de una distribución infinita de funciones de Direc. Caso de una red perfecta finita. Factor de estructura de una red perfecta. Espacio recíproco de un cristal finito y pequeño.

4. Teoría general de difracción por cristales reales

Clasificación de defectos. Concepto de red directa promedio y del factor de estructura promedio. Expresión general de la intensidad difractada por una red finita de átomos con defectos estructurales que no alteran el orden de largo alcance. Intensidad difusa producida por defectos en cristales reales, concepto de la función ϕ_m . Caso armónico. Expresión de la distribución de intensidades para defectos de desplazamiento y de sustitución. Forma general de diferenciarlos.

5. Defectos de sustitución

Cálculo de la función ϕ_m para una estructura ordenada AB, AAB y AABB. Obtención del factor de orden de corto alcance. Expresión de la intensidad difusa I_2 para una estructura con orden de corto alcance. Localización de los máximos difusos en el espacio recíproco de la matriz promedio. Diferencia con el caso de segregación de átomos B en una matriz A.

6. Defectos de desplazamiento

Análisis elemental de la función ϕ_m para ondas térmicas. Defectos planos en general, expresión de la intensidad correspondiente. Concepto de error de apilamiento. Obtención de la distribución de intensidades para un apilamiento con errores de desplazamiento lateral al azar. Análisis de la distribución de intensidades en un apilamiento compacto arbitrario formado por redes planas hexagonales. Caso de una estructura hexagonal con defectos de apilamiento. Caso de una estructura fcc.

PRACTICAS

Incluye problemas y prácticas de laboratorio

1. Diagramas de polvos con la cámara de Debye-Fcherrer y con difractómetro. Identificación de líneas.
2. Indexación de diagramas de Lave.
3. Problemas sobre defectos planos de sustitución y de ordenamiento a largo alcance.

REVISION

Naturaleza y propiedades de los Rayos X; Absorción, Dispersión coherente e incoherente.

Plaut

Parte B

TEORIA

- 1) Microscopio electrónico.
Diseño básico de un microscopio electrónico. Formación de imágenes y contraste. Área selecta de difracción. Resolución.
- 2) Teoría cinética de la difracción de electrones.
Longitud de onda de los electrones. Difracción de electrones en un cristal perfecto. Distancia de extinción. Efecto de las imperfecciones. Refracción. Amplitud difractada por un cristal distorsionado.
- 3) Diagrama de difracción
Construcción de la red recíproca. Indexado de diagramas. Zonas de Laue. Doble difracción. Línea de Kikuchi. Exactitud de los diagramas de difracción. Información cristalográfica obtenida de la estructura fina de los diagramas. Efectos de la geometría. Difracción de cristales maclados.
- 4) Teoría cinemática del contraste
Campo claro. Campo oscuro. Efecto de dos haces. Contraste de cristales imperfectos.
- 5) Teoría dinámica del contraste.
Desarrollo de la teoría dinámica en cristales perfectos. Solución de dos haces para cristales perfectos. Solución de dos haces para cristales no perfectos. Fallas de apilamiento. Determinación de las características. Discusión del contraste de fallas de apilamiento. Aplicación de la teoría dinámica a cristales con dislocaciones. Imagen de dislocaciones de borde y de hélice. Determinación del vector de Burgers.
- 6) Microscopía electrónica de barrido y microanálisis de alta resolución.
Características del microscopio electrónico de barrido. Formación de imágenes. Microanálisis de partículas.

PRACTICAS

Incluye la resolución de problemas y trabajos de laboratorio.

- 1) Preparación de muestras metálicas para ser observadas por microscopía electrónica de transmisión.
- 2) Observación e interpretación de imágenes y diagramas de difracción de electrones.
- 3) Observación e interpretación de imágenes en microscopía electrónica de barrido. Microanálisis de partículas.

BIBLIOGRAFIA

- "Elements of x-ray diffraction"
B.D.Cullity-Addison. Wesley Publishing Company. 1967.
- "X-ray diffraction procedures"
Harold P. Klug and Leroy E. Alexander. John Wiley and Sons. 1974.

Plaut

- "Introduction to solid state physics"
Charles Kittel. Wiley, New York . 1967.
- "International tables for x-ray crystallography"
Vol. 1. Kimocho press. Birmingham. 1952.
- "Electron microscopy of thin crystals"
A. Howie, P.B. Hirsch, P.R. Nicholson, D. W. Pashly, H.J.1965.
Whelan. Butterworths.
- "Fundamentals of transmission electron-microscopy"
R.D. Heidemreich. Interscience John Wiley. 1964.
- "Electron microscopy in materials science"
Third course of the international school of electron microscopy.
"Ettore Majorana" International centre for scientific culture, 1975.
- "Interpretation of electron diffraction patterns"
K.W. Andrews, D.J.Dyson and S.R.Keown, Adam Hiller Ltd., London. 1971.

Firma del Profesor:

A claración de Firma: Dr. R.H.Contreras

8 MAYO 1987

Firma del Director:

Dr. RUBEN H. CONTRERAS
DIRECTOR INTERINO
DEPARTAMENTO DE FISICA