

FI 45A Unidad IV

Identificación de fases por difracción de rayos X (XRD)

SEGURIDAD

1. RIESGOS ASOCIADOS A LA RADIACIÓN

I Radiaciones ionizantes

1. Pegue en su cuaderno una descripción del espectro electromagnético.
2. ¿Qué se entiende por rayos X "duros" y "blandos"?
3. Distinga entre radiaciones ionizantes y no ionizantes
4. Defina el
 - a. "roentgen"
 - b. "rem"
 - c. "rad"
5. Determine las exposiciones medias anuales debidas a
 - a. Exposición natural
 - b. Televisión
 - c. Diagnósticos médicos
6. Enumere fuentes de rayos X
 - a. En el hogar
 - b. En el laboratorio
 - c. Otros
7. Indique:
 - a. Medidas de seguridad antirradiación incorporadas automáticamente en los instrumentos
 - b. Medidas a ser ejecutadas por Ud.

II Radiaciones no ionizantes

1. Identifique las radiaciones no ionizantes a que puede verse expuesto
2. ¿Qué lugares del cuerpo son más sensibles? ¿Por qué?
3. Describa los efectos térmicos y no térmicos de las microondas, incluya la fig 5-4.
4. Describa las microondas, incluya la fig 5-4.
5. Describa el funcionamiento de un tubo "klystron" y del "magnetron".
6. ¿Qué año salieron al mercado los hornos de microondas?
7. Enumere y describa sus partes.
8. ¿A qué frecuencia opera? ¿cuál es la longitud de onda?
9. ¿Por qué y cómo calienta la comida?

2 Cristalografía

1. Explique qué se entiende por red cristalina.
2. Explique qué son y dé ejemplos:
 - (a) Monocristales
 - (b) Materiales policristalinos
 - (c) Cuasicristales
 - (d) Materiales amorfos

Nota: use los conceptos de orden de *corto y largo alcance*

3. Explique qué son los planos cristalinos (no necesita conocer la nomenclatura correspondiente)
4. Conozca los siguientes conceptos (hay modelos en el laboratorio de cristalografía):
 - (a) Celda unitaria
 - (b) Estructura cúbica
 - (c) Estructura tetragonal
 - (d) Estructura ortorrómbica

3 Difracción de rayos X

- a) Conozca y sepa enunciar la ley de Bragg para un monocristal.
 - b) Conozca su aplicación para una muestra de polvos.
 - c) Explique cómo puede usarse esta técnica (polvo) para identificar las fases en una muestra.
4. Averigüe en qué consiste la técnica de incidencia rasante y para qué se aplica (en inglés, grazing angle).
 5. Propiedades cristalográficas del 123
 - a) ¿Qué estructura tiene el 123 (forma abreviada de referirse al compuesto superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$) a alta temperatura, es decir, a la temperatura de sinterización de 970°C ?
 - b) ¿Qué estructura tiene a temperatura ambiente?
 - c) ¿Cuál es la temperatura de transición entre ambas fases cristalográficas?
 - d) ¿Está bien definida esta temperatura? ¿De qué otra cosa depende?
 - e) Busque en la literatura los valores aceptados de los parámetros a, b y c de la celda unidad de la fase superconductor.
 6. Calcule la distorsión con respecto a la simetría inmediatamente superior e indique si es posible resolverla con el instrumento disponible.

7 Visita al laboratorio de rayos X

Una vez aprobadas las secciones anteriores, se realizará una visita guiada para conocer el funcionamiento del difractor de polvo. Es necesario indicar el día y hora de la visita, que dura aproximadamente 1 hora. Se coordina directamente con la profesora María Teresa Garland.

8 Determinación de fases

- (a) Se enviará una muestra de un material cuyo difractograma debe ser usado por Ud. para identificarlo.
- (b) Cada grupo deberá determinar los máximos correspondientes.
- (c) También se determinará cada una de las longitudes $d(hkl)$.
- (d) Importante: la relación $d=d(\theta)$ no es lineal. Es necesario determinar el error de la distancia d debido a un error en θ . Derive esa expresión y úsela.
- (e) El resultado debe tabularse junto a los resultados de las tablas de cristalografía para el compuesto en cuestión.

9 Bibliografía

- CNR Rao, J Gopalakrishnan New directions in solid state chemistry Sección 3.2.1 (preparación de óxidos por técnicas cerámicas)
- Physics Today , octubre de 1992, p53-58 (superconductors de alta temperatura)
- Introduction to solid state physics, Ashcroft & Mermin Cap.6 (difracción de rayos X)
- Solid state physics: Burns, Kittel, etc. (difracción de rayos X)
- Solid state chemistry, techniques. Cheetham (difracción de rayos X)
- Solid state chemistry, techniques. Cheetham (difracción de rayos X)
- Structure of High Tc Superconductors MRS Bulletin Jan1989 p27-30.
- Cualquier libro de física del sólido o ciencia de los materiales
- M. Cyrot y D. Pavuna, Introduction to superconductivity and H Tc materials, cap 7
- Ehrenreich y Turnbull, eds, Solid State Physics.

10 Vínculos internet

- Estructuras cristalinas <http://www.kings.edu/~chemlab/vrml/index.html>
- Estructuras de sólidos inorgánicos http://www.chem.ox.ac.uk/icl/heyess/structure_of_solids/Strucsol.html
- Diagramas cristalográficos básicos <http://hobbes.gh.wits.ac.za/craig/diagrams/>
- The x-ray server <http://xray.uu.se/>
- Estructuras cristalinas de los superconductores <http://barns.ill.fr/dif/xtal-3d.super.html>
- Cuasicristales <http://www.cmp.caltech.edu/~lifshitz/quasicrystals.html>