

20445 TÈCNiques D'ANÀLISI DE MATERIALS CRISTAL·LINS

Tipus: Optativa Crèdits: 6

1. Els raigs X

Introducció. Producció de raigs X. Línies espectrals. Espectre continu i espectre discontinu. Llei de Douanne-Hunt. Llei de Moseley. Interaccions entre els raigs X i la matèria. Efecte fotoelèctric i fluorescència. Difusió elàstica. Altres interaccions. Absorció macroscòpica. Coeficient d'absorció. Filtres. Aplicacions pràctiques de les interaccions dels raigs X amb la matèria. Quadre general de tècniques.

2. Bases teòriques

Matrius i vectors. La funció de densitat electrònica. La funció factor d'estructura. Transformació de Fourier. Xarxa recíproca. Condicions de difracció. Equació de Laue. Construcció d'Ewald.

3. Mètodes de monocristall

Característiques generals. Classes de Laue. Llei de Friedel. Mètodes clàssics: Laue, rotació-oscil·lació, Weissenberg, precessió. Extincions sistemàtiques. Determinació del grup espacial. El difractòmetre automàtic. Correccions de Lorentz, de polarització i d'absorció. Concepte de determinació de l'estructura cristal·lina. El problema de les fases. Programes de resolució i d'afinament. Programes de dibuix. Observació estereoscòpica d'estructures. Anàlisi de resultats.

4. Mètodes de difracció de pols

Introducció. Mètodes d'enregistrament fotogràfic. Difractòmetre de pols. Anàlisi qualitativa. *Powder diffraction file*. Anàlisi quantitativa. Ajust de perfils. El mètode de Rietveld.

5. Fluorescència de raigs X

Introducció. Anàlisi qualitativa. Anàlisi quantitativa.