



Curso: Simulación computacional de patrones de XRD para polvos para identificación estructural de cúmulos metálicos con y sin ligandos

Duración: 4 sesiones

Modalidad: teoría + programación + simulación

Lenguaje: Fortran 90/95/2003

Visualización: Gnuplot

Software complementario: VESTA y PowderCell

Nivel: licenciatura avanzada / posgrado

Aplicación final: clústeres de Au protegidos con tioles

Instructor: Alfredo Tlahuice Flores

Objetivo general

Comprender los fundamentos de la difracción de rayos X de polvos y desarrollar programas en Fortran para calcular patrones PXRD de sistemas periódicos y finitos, comparando los resultados con VESTA, PowderCell y Gnuplot.

SESIÓN 1 — Fundamentos y ley de Bragg

- Principios físicos de la difracción de rayos X.
- Ley de Bragg y distancias interplanares.
- Espacio recíproco e índices de Miller.
- Estructuras cristalinas FCC, BCC y HCP.
- Estructura FCC de Au.
- Introducción a VESTA y PowderCell.
- **Fortran:** cálculo de las reflexiones mediante la ley de Bragg.
- **Gnuplot:** visualización y comparación de resultados.

SESIÓN 2 — Estructura cristalina y factor de estructura

- Dispersión por un átomo.
- Factor de estructura e intensidad.
- Construcción de estructuras FCC.
- Coordenadas atómicas y vectores de red.
- **Fortran:** generación de patrones de polvo FCC y cálculo del factor de estructura.
- **VESTA:** visualización de la estructura.
- **PowderCell:** cálculo independiente del patrón PXRD.
- **Gnuplot:** comparación de los resultados.





SESIÓN 3 — Sistemas finitos y ecuación de Debye

- Difracción de polvos y orientación aleatoria.
- Cristales periódicos, nanopartículas y clústeres.
- Limitaciones de la descripción de Bragg para sistemas finitos.
- Distancias interatómicas.
- Ecuación de Debye.
- **Fortran**: cálculo PXRd a partir de archivos XYZ.
- Distribución de distancias interatómicas.
- **VESTA**: análisis de las estructuras.
- **Gnuplot**: patrones PXRd y distribución de distancias.

SESIÓN 4 — Clústeres de Au protegidos con tioles

- Estructura de clústeres de oro protegidos.
- Núcleo metálico y ligandos.
- Ecuación de Debye multicomponente.
- **Fortran**: cálculo y comparación de patrones de diferentes clústeres.
- Análisis de las contribuciones Au–Au, Au–S, S–S, C–C, etc.
- **VESTA**: comparación estructural de isómeros.
- **Gnuplot**: comparación de patrones y distribuciones de distancias.
- Análisis del efecto de la capa protectora sobre el patrón PXRd.

Programa integrador PXRd.FOR

1. Ley de Bragg
2. Patrón de polvo FCC
3. Factor de estructura
4. Ecuación de Debye a partir de XYZ
5. Distribución de distancias
6. Comparación de clústeres

Proyecto final

A partir de estructuras seleccionadas de clústeres de Au protegidos con tioles, el estudiante deberá **visualizar la estructura con VESTA, calcular el patrón PXRd con Fortran, visualizarlo con Gnuplot y comparar los resultados con software de difracción disponible**, relacionando las diferencias estructurales con las diferencias observadas en los patrones.

