

Técnico Superior SGIKER (Rayos X. Moléculas y Materiales) Grupo

1

Categoría Profesional: Técnico Superior SGIKER

Especialidad: Rayos X

REQUISITOS PARA PARTICIPAR EN EL PROCESO

Requisito b) de la Base segunda:

- Doctorado
- Ingeniería o Grado equivalente.

FUNCIONES:

1. Mantenimiento de periféricos (impresoras, unidades de backup, etc.) y de fungible de poca cuantía.
2. Backups periódico de los equipos de control (fundamentalmente datos medidos).
3. Control de acceso y registro de medidas.
4. Control y mantenimiento de señalizaciones: reparaciones muy simples que requieren conocimiento de los motivos más usuales que pueden provocar una parada del equipo.
5. Atención a los circuitos de refrigeración.
6. Atención de los sistemas de aire acondicionado.
7. Suministro de gases licuados para los sistemas de baja temperatura.
8. Suministro de gases inertes.
9. Sustitución de los tubos de rayos X. Compra y control de los mismos.
10. Realineamiento de la óptica tras un cambio de tubo (correcto posicionamiento del tubo y monocromador y recalibración de los detectores)
11. Puesta en marcha de los equipos de alta y baja temperatura
12. Actualizaciones de los programas de control (si se requieren) y bases de datos.
13. Conocimiento técnico de los equipos: estudio detallado de los planos de circuitería. Capacitación para resolver pequeñas averías o establecimiento de la zona averiada que permita una reparación bajo soporte telefónico.
14. Capacitación básica desde el punto de vista científico.
15. Desarrollo y puesta en marcha de complementos simples "ad-hoc" que mejorarían las prestaciones de los equipos.
16. Realización de medidas rutinarias y sistemáticas.
17. Control y actualización , con orientación de los responsables científicos de software (dónde y cómo obtener nuevos programas tanto de control como de tratamiento de datos).
18. Realización, con orientación de los responsables científicos de medidas más sofisticadas.
19. Incorporación de metodologías de calidad en el funcionamiento interno del servicio.

TEMARIO.

Rayos X. Moléculas y Materiales.

Temario

1. Nociones de cristalografía. Elementos de simetría de los cristales. Ejes cristalográficos. Los seis sistemas de clasificación de los cristales. Definición de los índices de Miller. Ecuación de un plano cristalográfico. La celda unidad. Las 14 redes de Bravais. La red recíproca. Grupos puntuales de simetría. Grupos espaciales de simetría.
2. Generación de rayos X. Naturaleza de la radiación electromagnética. Espectro electromagnético de la luz. El fotón. Origen de los rayos X. Sistemas comerciales de generación de rayos X.

3 Detección de rayos X. Espectrometría de la radiación. Detectores de ionización: La cámara de ionización, los contadores proporcionales, el contador Geiger y sus curvas características. Detectores de centelleo: El fotomultiplicador. Detectores PSD. Detectores bidimensionales: Image Plate y CCD. Dispositivos para dosimetría y protección radiológica: Dosimetría ambiental y personal. Dosímetros personales: Dosímetros de ionización, dosímetros fotográficos, dosímetros de termoluminiscencia.

4. Interacción de los rayos X con la materia. El espectro de rayos X de un elemento: Espectro continuo y espectro característico. Atenuación de los rayos X: Absorción de rayos X. Mecanismos de atenuación de rayos X: Efecto fotoeléctrico, Efecto Compton, creación de pares. Radiación de frenado. Fluorescencia. Dispersión de rayos X. Colimación de rayos X. Monocromatización de los rayos X.

5. Difracción de rayos X. La difusión de los rayos X por la materia en estado gaseoso, líquido y sólido. Difusión elástica e inelástica de los rayos X por un electrón. Difusión de los rayos X por un átomo. El factor de difusión atómico. Difusión anómala. Difusión de los rayos X por agrupaciones de átomos.

6. Difracción de rayos X por un cristal. Ecuaciones de Laue. Ley de Bragg. Interpretación de la ley de Bragg en términos de la red recíproca. Equivalencia de las ecuaciones de Laue y de la ley de Bragg. La intensidad de la difracción. El factor de estructura. Simetría de la difracción: Ley de Friedel. Extinciones sistemáticas. Factores que afectan la intensidad de la difracción. El factor de polarización. El factor de Lorentz. El factor de temperatura. El factor de multiplicidad. Modelización de la absorción.

7. El método de difracción de rayos X en polvo. Características de las muestras medidas: Aplicaciones y limitaciones. Métodos de preparación de las muestras. Elección de las condiciones experimentales y procedimientos. Componentes y funcionamiento de un difractómetro de rayos X de polvo. Cargadores de muestras. Cuna de Euler. Modificación de sistemas de generación de rayos X. Ajuste y modificación de óptica primaria y secundaria. Ajuste y sustitución de cámaras de alta y baja temperatura. Procedimientos de annealing. Ajuste y modificación de sistemas de detección de Rayos X. Ajuste de monocromador primario. Ajustes de ventanas de discriminación. Control de sistemas de posicionamiento.

8. Análisis cualitativo de un diagrama de difracción de rayos X en polvo. Identificación de las fases existentes en el diagrama: Base de datos cristalográficas. Análisis cuantitativo de un diagrama de difracción de rayos X. Métodos de cuantificación de N fases en un diagrama de difracción. Medidas de difracción mediante el empleo de patrones internos. Determinación del tamaño de dominio coherente de difracción. Análisis de contribución instrumental. Cálculos de strain. Análisis de anisotropías. Determinación de texturas. Simulación de diagramas de polos. Análisis de muestras amorfas. Determinación de stress. Método $\sin^2(\chi)$. Cálculo de espesores. Ajustes de perfil completo sin/con modelo estructural. Medidas de micro-difracción. Medidas a bajo ángulo. Difracción con control de temperatura y atmósfera.

9. Difracción de rayos X en monocristal. Características de las muestras: Aplicaciones y limitaciones. Selección del cristal. Preparación y montaje de muestras. Elección de las condiciones experimentales. Análisis de la calidad de la muestra. Componentes y funcionamiento de un difractómetro de rayos X de monocristal. Mantenimiento de los sistemas de refrigeración. Control del sistema de medida a altas y bajas temperaturas, así como mantenimiento del mismo. Ajuste de microfuentes. Ajuste y mantenimiento de los sensores de caudal. Selección de fuente. Toma de datos con cristales inestables. Indexación de las caras de un cristal.

10. Difracción de rayos X en monocristal. Determinación de la celda unidad y grupo espacial del cristal. Análisis cuantitativo de un diagrama de difracción de rayos X de monocristal: Reducción de datos, control del software CrysAlis. Resolución de una estructura cristalina: Función de Patterson, Métodos Directos, Series de Fourier, Máxima entropía, Charge flipping. Refinamiento de una estructura cristalina. Tratamiento de maclas merohedricas y no merohédricas. Control de los diferentes programas de resolución y refinamiento de estructuras. Resolución de problemas de desorden en las estructuras. Eliminación de densidad residual sin asignar. Protocolo para depositar estructuras cristalinas en las bases de datos correspondientes. Determinación de configuraciones absolutas con y sin la presencia de átomos pesados. Funcionamiento y actualización de la base de datos cristalográfica CSD. Aplicaciones y utilidad de la citada base.

11. Química elemental y seguridad en el laboratorio. Preparación de disoluciones. Reacciones ácido-base. Reacciones de oxidación-reducción. Nociones de química del estado sólido. Reacciones de estado sólido: molienda, tamizado, calcinación, sinterización. Métodos de análisis. Métodos de limpieza y eliminación de residuos. Procedimientos de trabajo en función de los peligros y toxicidad de las muestras.

12. Seguridad e Higiene en el trabajo. Orden, limpieza, color y señalización. Factores de riesgo. Medidas de prevención y protección. Protección de máquinas. Protección personal. Actuaciones en casos de accidente. Primeros auxilios.

13. Conceptos básicos de radioprotección. Magnitudes y unidades radiológicas: Exposición, kerma, dosis absorbida, dosis equivalente. Magnitudes derivadas: Dosis anual genéticamente significativa, dosis interna integrada, dosis efectiva. Relación actividad-exposición, relación exposición-dosis. Factores de riesgo y ponderación. Relación dosis-efecto. Protección radiológica. Límites legales de dosis, sistema de limitación de dosis y niveles de referencia.

14. Efectos biológicos de la radiación. La célula: composición química y estructura. Núcleo y DNA. Los tejidos humanos. Interacciones biológicas básicas de la radiación. Efectos estocásticos y no estocásticos. Mecanismos de interacción: directos e indirectos. Efectos en los cromosomas. Radiosensibilidad. Respuesta celular a la radiación. Respuesta sistemática a la radiación y efectos sobre los diferentes tejidos y órganos humanos.

15. Legislación española sobre instalaciones generadoras de radiación ionizante. Reglamento sobre instalaciones nucleares y radiactivas. Clasificación de las instalaciones radiactivas. Autorizaciones administrativas y requisitos del personal que trabaja con estas instalaciones. Reglamento sobre protección sanitaria. Las funciones del Operador y el Supervisor de instalaciones generadoras de radiación ionizante. Requisitos para la obtención de la licencias de operador y supervisor. Responsabilidades del Operador y el Supervisor: Obligaciones, limitaciones y responsabilidad penal. Inspección de la instalación. Diario de operación, archivos e informes anuales.

16 Ley 4/2005, de 18 de febrero, para la Igualdad de Hombres y Mujeres: objeto y fin de la norma. Principios generales. Medidas para promover la igualdad en la normativa y actividad administrativa

Bibliografía

Borchardt-Ott, W. (1995) Crystallography. 2ª Ed. Springer-Verlag.

Consejo de Seguridad Nuclear <http://www.csn.es>

Cuevas Diarte, M.A.; Calvet, T.; Galí, S.; Labrador, M.; Nogués, J.M.; Solans, J.; Solans, X; Tauler, E. y Vendrell, M. (2002) Problemas de Cristalografía.. Barcelona: Publicacions Universitat de Barcelona.

Galí, S. (1992) Cristalografía. Teoría Reticular, Grupos Puntuales y Grupos Espaciales.. Barcelona: Ed. Universitat de Barcelona.

Giacovazzo, C.; Monaco, H.L.; Artioli, G.; Viterbo, D.; Ferraris, G.; Gilli, G.; Zanotti, G. y Catti, M. (2002) Fundamentals of Crystallography. 2ª Ed. Series: International Union of Crystallography Texts on Crystallography. IUCr-Oxford Science Pu.

<http://161.116.85.21/crista/PDF-crista/raigsX-geometria.pdf>

<http://www.xtal.igfr.csic.es/Cristalografia/>

McKie, D. y McKie, C. (1986) Essentials of Crystallography. Oxford: Blackwell Scientific.

Moore, D.M. y Reynolds Jr. R.C. (1997): X-Ray Diffraction and the Identification and Analysis of Clay Minerals. 2ª ed. Oxford University Press, Oxford, 378 p.

Nesse, W.D. (2004): Introduction to optical mineralogy, 3rd ed., Oxford University Press, New York, 348 p.

Rousseau, J.J. (1998) Basic Crystallography. John Wiley & Sons.

Sands, D.E. (1984) Introducción a la Cristalografía. Barcelona: Reverté.

Vitalij K. Pecharsky, Peter Y. Zavalij, Fundamentals of powder diffraction and structural characterization , springer (2005)

Documentación sobre cristalografía y difracción incluida en la página www.iucr.org/iucr-top/comm/cteach/pamphlets.html

HAMMOND, C., The Basics of Crystallography and Diffraction, IUCR, Texts on Crystallography, Oxford Science Publications, 1997.

MASSA, W., Crystal Structure Determination, Springer, 1996.

WOOLFSON, M.M., An Introduction to X-ray Crystallography. Cambridge University Press 2ª Ed., 1997

William Clegg, Crystal Structure Determination (Oxford Chemistry Primers). Oxford University Press, 1998. ISBN: 0198559011.

Werner Massa, Crystal Structure Determination, Second Edition. (Translation: Robert O. Gould.) Springer, 2004. ISBN: 3540206442.

DUNITZ, J.D, X-ray Analysis and the Structure of Organic Molecules. Wiley-VCH, 1995. ISBN: 3906390144.

Werner Massa (Traducción Robert O. Gould), Crystal Structure Determination, 2a. Ed.. Springer, 2002. ISBN: 3540206442.

P. Müller, R. Herbst-Irmer, A. L. Spek, T. R. Schneider and M. R. Sawaya, Crystal Structure Refinement: A Crystallographer's Guide to SHELXL. (IUCr Texts On

Crystallography.) Oxford University Press, 2006. ISBN: 0198570767