

Curso de posgrado

Método de Rietveld aplicado a Difracción de Rayos X de Polvos					
Indique el/las área/s de Doctorado para las que el curso es dirigido					
Cs. Biológicas		Física	x	Ciencias Ambientales	
Química	x	Matemática			
Característica del curso (Teórico, práctico, teórico-práctico, etc)		Teórico-práctico			
Modalidad del curso (presencial, a distancia, combinada). Indicar en porcentaje el dictado a distancia.		Presencial			
Carga horaria semanal		40			
Duración total en horas (distinguir horas de teoría, práctica, teoría/práctica, presencial y a distancia)		Total: 40 hs Horas de Teoría: 15 hs Horas de Práctica: 25hs			
Tipo de evaluación y requisitos de aprobación (máx. 2000 caracteres). Si la evaluación no es presencial indicar los instrumentos y soportes que se emplearán para evaluar los aprendizajes y competencias de los/as alumnos/as.					
Evaluación escrita teórico - práctica. Análisis de casos. Aplicación del Software Fullprof para un difractograma. Refinamiento estructural y cuantificación de fases					
Breve descripción de los contenidos y su vinculación con los objetivos de la carrera (máx. 1000 caracteres)					
Los aspectos estructurales a nivel atómico de la materia sólida (la cristalografía) son abordados por la Física del estado sólido y también por la química del estado sólido. En las carreras de Física y Química de la Facultad se ven conceptos básicos de esta disciplina. Este curso profundiza los contenidos de grado y provee herramientas prácticas para la implementación del refinamiento estructural a partir de la Difracción de Rayos X y es de utilidad para la caracterización estructural de materiales sólidos cristalinos involucrados en la realización de las tesis de grado y los Doctorados de estas carreras.					
Describir los objetivos del curso (máx. 2000 caracteres)					
Lograr que los participantes adquieran un buen manejo de los fundamentos físicos de la Cristalografía en general y del Método de Rietveld aplicado a la difracción de polvos y aprendan a aplicarlos a casos reales. Entrenamiento en el empleo de bases de datos de estructuras cristalinas. Entrenamiento en el empleo del programa Fullprof de refinamiento y análisis de estructuras cristalinas y sus aplicaciones.					
Indicar los contenidos del curso (máx. 2000 caracteres)					

<p>Ya que se requiere de los participantes conocimientos básicos en cristalografía y difracción de rayos X, en primer lugar se abordarán a modo de repaso estos temas:(simetrías cristalinas. Cristalografía en el espacio directo y en el recíproco. Tablas Cristalográficas. Física de los rayos X. Dispersión de rayos x por electrones, átomos y sólidos. Factor de forma atómico.</p> <p>Difracción de rayos X por cristales. Factores de Estructura. Manejo de muestras. Introducción al instrumental y a la adquisición de datos de intensidades de difracción)</p> <ul style="list-style-type: none"> - Fundamentos del Método de Rietveld: Fundamentos matemáticos. Descripción de los parámetros globales y de cada fase incluidos en el refinamiento - Descripción y utilización del Programa Fullprof. Entrenamiento en empleo del programa. - Uso de bases de datos. - Aplicaciones de la difracción de polvos y el Método de Rietveld en ciencia de materiales. Análisis de Casos
<p>Si corresponde, describir las actividades prácticas previstas, indicando lugar donde se desarrollarán, modalidad de supervisión y modalidades de evaluación (máx. 2000 caracteres).</p>
<p>Las actividades prácticas consistirán en la utilización del Programa Fullprof , para familiarización con el programa y entrenamiento. Los alumnos deberán concurrir con sus computadoras personales para tal fin.</p>

Requisitos deseables para la inscripción

Egresados y alumnos avanzados de Lic en Cs. Qcas. - Lic. en Física - Lic. en Geología - Ing. Qco.—Ing. en Materiales, con conocimientos básicos en cristalografía y difracción de rayos X.

Programa

1- Elementos de cristalografía y Fundamentos de la Difractometría de polvos: Elementos de simetría en un cristal periódico. Red recíproca. Fundamento físico de la difracción, Ley de Bragg; Densidad electrónica y factores de estructura. Técnicas experimentales: métodos de polvo cristalino. Interpretación de los datos.

2- Fundamentos del Método de Rietveld: Fundamentos matemáticos. Descripción de los parámetros globales y de cada fase incluidos en el refinamiento.

3- Condiciones experimentales: Preparación de la muestra. Toma de datos. Estadística de conteo

4- Descripción y Utilización del Programa Fullprof: Instalación de Programa Fullprof. Pautas generales en el manejo del programa. Parámetros instrumentales. Problemas más comunes. Criterios de ajuste. Ejemplos de aplicación. Prácticas en computadora

5-Aplicación del método de Rietveld: análisis cuantitativo de fases y determinación de tamaño cristalino. Ejemplos. Prácticas en computadora.

Bibliografía

- B.D. Cullity: "Elements of x-ray diffraction" 2ª ed. (Addison-Wesley, 1976) o 3ª ed. (Prentice-Hall, 2001))

- KLUG, H.P. and ALEXANDER, L.E., X-ray diffraction preceding: for polycrystalline and amorphous materials, John Wiley & Sons, New York, 1974. - WYCKOFF, R.W. Crystal Structures, Interscience Publishing, New York, 1981.

H.M Rietveld, "A profile refinement method for nuclear and magnetic structures"; J. Appl. Crystal., 2 (1969), p. 65-71.

- R. A.Young, "The Rietveld Method"; 1993, International Union Crystallography, Oxford University Press. Oxford.

- D.L.Bish and S. Howard, "Quantitative phase analysis using the Rietveld method"; J. Appl. Cryst. 21 (1988), p. 86-91

- N. V. Y. Scarlett, I. C. Madsen, L. M. D. Cranswick, T L, Edward Groleau, G Stephenson, M Aylmore and N Agron-Olshina Outcomes of the International Union of Crystallography Commission on Powder Diffraction Round Robin on Quantitative Phase Analysis: samples 2, 3, 4, synthetic bauxite, natural granodiorite and pharmaceuticals. J. Appl. Cryst.. 35 (2002) p. 383-400

- D. Balzar, N. Audebrand, M. R. Daymond, A. Fitch, A. Hewat, J. I. Langford, A. Le Bail, D. Lou"er, O. Masson, C. N. McCowan, N. C. Popa, P. W. Stephens and B. H. Toby. Size-strain line-broadening analysis of the ceria round-robin sample. J. Appl. Cryst. (2004). 37, 911-924

Bibliografía en línea:

- <https://www.cryst.ehu.es/> (Grupos espaciales)

- <https://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia>