

Curso: Método de Rietveld para el refinamiento cristalino

Objetivo: Conocer los fundamentos del Método de Rietveld, sus aplicaciones y entrenarse en la utilización de programas de identificación de fases y refinamiento de estructuras cristalinas.

Duración y modalidad: 25 horas. Teórico - Práctico

Programa:

1- **Elementos de cristalografía:** Nociones básicas de cristalografía, incluyendo simetría cristalina, grupos espaciales y descripción de la estructura de un cristal periódico: Redes cristalinas. Elementos de simetría en un cristal periódico. Grupos espaciales. Tablas internacionales de cristalografía. Ejemplos de estructuras cristalinas.

2- **Fundamentos de la difracción de rayos X en polvo:** Red recíproca. Fundamento físico de la difracción. Difracción en un cristal: ecuaciones de Laue; ley de Bragg; Densidad electrónica y factores de estructura. Factor de forma atómica; corrección térmica de Debye-Waller. Extinciones sistemáticas: ley de Friedel.

3- **Difractometría:** Técnicas experimentales: fuentes de radiación. Correcciones sobre los datos medidos: de Lorentz, polarización, absorción y extinción. Refinamiento estructural.

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

5- **Descripción y Utilización del Programa Fullprof y Topas®:** Instalación de Programa Fullprof. Pautas generales en el manejo del programa. Toma de datos. Preparación de la muestra. Parámetros instrumentales. Problemas más comunes. Estadística de conteo. Criterios de ajuste. Ejemplos de aplicación. Prácticas en computadora.

Bibliografía:

- B.D. Cullity: "Elements of x-ray diffraction" 2ª ed. (Addison-Wesley, 1976) o 3ª ed. (Prentice-Hall, 2001)
- H.P.Klug, L.E.Alexander: "X-ray diffraction procedures" (Wiley, 1974)
- D.L.Bish, J.E.Post, eds.: "Modern powder diffraction" (Reviews in Mineralogy, Vol.20; Miner.Soc. of America, 1989)
- R. Young: "The Rietveld method" (IUCr / Oxford University Press, 1996)