



## Ficha técnica de materias optativas

<b>Nombre del curso:</b> REFINAMIENTO POR EL MÉTODO DE RIETVELD
<b>Docente:</b> CÉSAR SHIMIZU DURÁN
<b>Días y horarios:</b> LUNES DE 08:00-11:00
<b>Cupo máximo:</b> 16 estudiantes
<b>Criterios de inscripción (si aplica):</b> Conocimientos Cristalografía y Difracción de Rayos X, pc personal
<b>Conceptos básicos:</b> Simetría, estructura, celda unitaria, cristalografía, patrón de difracción, índices de Miller, coordenadas cristalográficas, tipos de redes
<b>Justificación:</b> El método de Rietveld es una técnica que proporciona información cualitativa detallada de la estructura cristalina de un material, así como su concentración en una mezcla de fases, tamaño promedio de cristal y microdeformaciones en cada fase. Esta información es básica para interpretar las propiedades del material, por ejemplo: la dureza (que depende del tamaño de cristal y la concentración de las fases); color (ocupación de los sitios en los distintos poliedros de coordinación); propiedades semiconductoras (diferentes formas alotrópicas); superconductividad (concentración de oxígeno, cambios en los parámetros de red).
<b>Objetivo general:</b> Que el alumno sea capaz de comprender los fundamentos del Método de Rietveld y aprender a emplear la técnica con el software de libre distribución FullProf, con los cuales podrá realizar la descripción de las propiedades del material de bajo estudio.
<b>Objetivos específicos:</b> Que el alumno aprenda a editar los archivos *.raw que entrega el equipo de difracción de rayos x para utilizarlos en un refinamiento por el Método de Rietveld Que el alumno aprenda a crear archivos *.pcr para el análisis de la cristalografía y estudiar estructuras cristalinas mediante el refinamiento por el Método de Rietveld Que el alumno aprenda a graficar los diferentes datos obtenidos por el Método de Rietveld Que el alumno sintetice nanomateriales con estructuras específicas Que el alumno analice los datos cristalográficos y estructurales obtenidos por el Refinamiento por el Método de Rietveld de los nanomateriales sintetizados y los asocie con sus propiedades físicas
<b>Método de trabajo:</b> Manejo del Software y edición de archivos *.pcr por parte de los estudiantes. Exposición oral por parte del profesor. Análisis y Discusión sobre material bibliográfico.
<b>Criterios de evaluación:</b> Cumplir con un 80% de asistencia, puntualidad, participación en clase, tareas individuales y por equipo, examen
<b>Temario:</b> 1. INTRODUCCIÓN - Difracción de Rayos-x por el método de polvos



## Ficha técnica de materias optativas

<ul style="list-style-type: none"><li>- Identificación de estructuras cristalinas</li><li>- Cristalografía</li></ul> <p>2. Refinamiento de estructuras cristalinas</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Aplicación de la técnica de Refinamiento</li><li>- Antecedentes</li><li>- El Método de Rietveld</li></ul> <p>4. Software para refinamiento de estructuras cristalinas</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Instalación de software FullProf</li><li>- Instalación de PowdII Converter</li><li>- Creación de ficheros</li><li>- Códigos de refinamiento</li><li>- Winplotr</li><li>- Demo de un refinamiento completo</li></ul> <p>5. Contribuciones de un patrón de difracción</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Polarización de los rayos-x</li><li>- Fases cristalinas</li><li>- Demo de un refinamiento completo</li></ul> <p>6. Ensanchamiento de los picos de difracción</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Microestructura</li><li>- Tamaño promedio del cristal</li><li>- Microdeformaciones</li><li>- Distribución de tamaño de cristal</li><li>- Vibraciones de los átomos</li><li>- Orientación preferencial</li><li>- Demo de un refinamiento completo</li></ul> <p>7. Refinamiento de una muestra con varias fases</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Determinación de concentración de fases</li></ul> <p>8. Información de ficheros de refinamiento</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- Obtención de longitudes de enlace</li><li>- Gráfica representativa de un refinamiento de Rietveld</li><li>- Reporte de la cristalografía generada</li></ul>
<p><b>Bibliografía:</b></p> <p>R.A. YOUNG. The Rietveld Method. (1993) International Union of Crystallography. OXFORD University Press. New York.</p> <p>INTERNATIONAL TABLES FOR CRYSTALLOGRAPHY (2004). First edition. The International Union of Crystallography. USA.</p> <p>C. Pico, M.L. López, M.L. Veiga. Cristaloquímica de Materiales. (2007). Editorial Síntesis. España.</p> <p>C. Klein, C.S. Hurlbut. Manual de Mineralogía (2006). Editorial Reverté. España.</p>