

# Curso Avanzado: El Método de Rietveld para Refinamiento de Estructura Cristalina

Fecha: 28 de septiembre - 2 de octubre de 2015

Lugar: INTI Química

General San Martín, Buenos Aires, Argentina

El Sistema Nacional de Rayos X, dependiente de la Secretaría de Articulación Científico Tecnológica (MINCyT), junto con el Instituto Nacional de Tecnología Industrial (INTI - Química), convocan a participar del curso avanzado El método de Rietveld para refinamiento de estructura cristalina.

## **Coordinadora:**

Lic. Sandra Amore (INTI)

## **Profesores:**

Dr. Diego G. Lamas (CONICET / Escuela de Ciencia y Tecnología - Universidad Nacional de Gral. San Martín)

Dr. Federico Napolitano (CONICET / Centro Atómico Bariloche - CNEA)

## **Introducción y Propósito:**

Se espera que los alumnos que realicen el curso adquieran conocimientos sobre:

- Los fundamentos de la Difracción de Rayos X. Teoría cinemática de la difracción de rayos X (XRD). La técnica de difracción de rayos X de polvos (XPD): teoría básica y aspectos experimentales.
- Fundamentos matemáticos del método de Rietveld.
- Uso de programas para refinamiento de estructura por el método de Rietveld.
- Aplicaciones básicas en materiales sencillos: determinación precisa de parámetros cristalográficos, análisis cuantitativo, tamaño de cristalita, etc.
- Aplicaciones avanzadas: (i) Análisis secuencial de datos de difracción de rayos X en función de un parámetro (temperatura, por ejemplo). (ii) Análisis combinado de difracción de rayos X y de neutrones.

**Objetivos:** El curso permitirá a alumnos adquirir los conocimientos avanzados de análisis de datos de difracción de rayos X de polvos mediante el método de Rietveld. Se verán los fundamentos matemáticos, ejemplos concretos de su empleo y aplicaciones más importantes.

## **Programa:**

### **1. Difracción de rayos X de polvos**

Fundamentos de la Difracción de Rayos X. Teoría cinemática de la difracción de rayos X (XRD). La técnica de difracción de rayos X de polvos (XPD): teoría básica y aspectos experimentales. Difractómetros convencionales de laboratorio: la geometría de haz divergente o Bragg-Brentano. XPD con luz sincrotrón: la geometría de haz paralelo. Configuraciones experimentales habituales de colección de datos de XPD con luz sincrotrón a temperatura y presión ambiente y condiciones no

ambientes de: temperatura, presión, tiempo de reacción, etc. Aplicaciones más importantes y ejemplos.

## **2. Fundamentos del Método de Rietveld**

Introducción al método de Rietveld. Fundamentos matemáticos del método. Parámetros estructurales y parámetros globales. Factores de acuerdo. Estrategias de “encendido” de parámetros.

## **3. Programa *FullProf* para refinamiento de estructura por el método de Rietveld**

Uso de uno de los programas más conocidos, *FullProf*. Características generales del programa. Archivos de entrada y de salida. Ejemplos con distintas geometrías o condiciones experimentales.

## **4. Aplicaciones básicas**

Ejemplos de aplicaciones habituales: (i) Determinación de parámetros estructurales en compuestos inorgánicos. (ii) Análisis cuantitativo en muestras polifásicas. (iii) Análisis del perfil de los picos de Bragg: tamaño medio de cristalita y microdeformaciones.

## **5. Aplicaciones avanzadas**

Ejemplos de aplicaciones avanzadas de la técnica (i) Análisis secuencial de datos de difracción de rayos X en función de la temperatura. (ii) Análisis combinado de difracción de rayos X y de neutrones.

**Duración:** 1 semana - 40 horas

**Aprobación del curso:** Para la aprobación del curso, a la finalización del mismo se tomará un examen escrito.

Se otorgará ayuda económica para gastos de pasajes y viáticos.

Para consultas e inscripción escribir a: [samore@inti.gob.ar](mailto:samore@inti.gob.ar). Cupo limitado.