

Difracción de polvo y métodos de Rietveld

**MÁSTER UNIVERSITARIO EN CRISTALOGRAFÍA Y
CRISTALIZACIÓN**

UNIVERSIDAD INTERNACIONAL MENÉNDEZ PELAYO

Este documento puede utilizarse como documentación de referencia de esta asignatura para la solicitud de reconocimiento de créditos en otros estudios. Para su plena validez debe estar sellado por la Secretaría de Estudiantes UIMP.



DATOS GENERALES

Breve descripción

El **Módulo III - Cursos de especialización**, del que forma parte esta asignatura, incluye una selección de asignaturas en temas especializados que permitirán al alumno diseñar, con la ayuda de su tutor, el conjunto de conocimientos y habilidades que mejor se adapten a sus expectativas investigadoras o laborales. El alumno deberá cursar un total de 6 ECTS en este módulo.

Varias de las asignaturas ofertadas en este módulo se imparten en forma de cursos intensivos internacionales de una semana de duración abiertos a estudiantes no inscritos en el Máster, con el objetivo de diversificar y enriquecer el entorno de formación de los estudiantes con un mayor número y variedad de profesores y compañeros (futuros colegas y colaboradores).

Por la naturaleza de la enseñanza en este módulo, las asignaturas, en especial las que se corresponden con cursos internacionales, se impartirán en diferentes ubicaciones, incluyendo laboratorios extranjeros cuando la especificidad del tema así lo imponga (por ejemplo, la asignatura de "Cristalografía en grandes instalaciones"). La oferta de asignaturas, así como el número máximo de estudiantes en cada asignatura y el mínimo necesario (en su caso), se fijarán y comunicarán anualmente. Algunas de las asignaturas correspondientes a cursos internacionales tendrán periodicidad bianual.

La asignatura de **Difracción de polvo y métodos de Rietveld** pretende ofrecer a los alumnos un conocimiento fundamental, tanto desde el punto de vista teórico como desde el aplicado, que les permita extraer la siguiente información que hay (o puede haber) en los difractogramas de polvo:

- Adquirir datos de difracción con la mayor calidad posible en función del problema a tratar.
- (Auto)indexación de difractogramas (al menos los que sean monofásicos).
- Refinamiento de una estructura cristalina partiendo de un modelo estructural aproximado.
- Familiarizarse con la resolución 'ab initio' de estructuras cristalinas a partir de datos de difracción de polvo para estructuras sencillas.
- Análisis de fases cuantitativos para muestras que sean mezclas de compuestos cristalinos.
- Familiarizarse con la extracción de información microestructural a partir de los difractogramas de polvo de alta resolución.

Título asignatura

Difracción de polvo y métodos de Rietveld

Código asignatura

101181

Curso académico

2016-17

Planes donde se imparte

[MÁSTER UNIVERSITARIO EN CRISTALOGRAFÍA Y CRISTALIZACIÓN](#)

Créditos ECTS

3

Carácter de la asignatura

OPTATIVA

Duración

Anual

Idioma

Inglés

CONTENIDOS

Contenidos

La asignatura se estructura en dos bloques temáticos (teoría y prácticas):

a) Difracción de polvo y el método de Rietveld (clases teóricas)

- Aplicaciones cristalográficas de la difracción de polvo.
- Indexación de difractogramas de polvo.
- Preparación de muestras y condiciones de medidas en difracción de polvo.
- Fundamentos del método de Rietveld.
- Descripción de los índices residuales y la extracción de intensidades integradas.
- Estrategias de afinamiento y descripción detallada del perfil. Ejemplo de aplicaciones con el programa FULLPROF.
- Introducción a los métodos de determinación de estructuras cristalinas ab-initio a partir de datos de polvo: Ejemplos de aplicaciones del programa de métodos directos XLENS.
- Completado del modelo estructural y afinamiento con restricciones geométricas.
- Análisis cuantitativo multifásico por el método de Rietveld.
- Análisis microestructural a partir de datos de alta resolución.
- Bibliotecas de programas y de estructuras. Bibliografía general.

b) Difracción de polvo y el método de Rietveld (sesiones prácticas)

- Prácticas de indexación con el programa DICVOL06 y otros programas de autoindexación incluidos en WinPLOTTR/Fullprof. Eliminación manual del fondo con el entorno gráfico del programa WinPLOTTR.
- Uso del programa FULLPROF parte (1): "pattern matching" y extracción de intensidades.
- Uso del programa FULLPROF parte (2): afinamientos monofásicos simple. Uso de un estándar para la calibración del difractómetro.
- Uso del programa XLENS con intensidades extraídas en la práctica número 2. Resolución estructural y afinamiento con restricciones.

- Uso del programa FULLPROF parte (3): afinamiento Rietveld de muestras complejas: datos Cu Ka 1 y radiación sincrotrón.
- Uso del programa FULLPROF parte (4): afinamiento Rietveld de muestras complejas: datos de difracción de neutrones.
- Uso del programa FULLPROF parte (5): análisis cuantitativo de mezclas multifásicas y uso de patrón interno para determinar la cantidad de fase amorfa.
- Uso del programa FULLPROF parte (6): análisis microestructural de fases complejas.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE Y DE FORMACIÓN

Generales

CG1.- Capacidad de análisis y síntesis

CG2.- Resolución de problemas

CG3.- Trabajo en un equipo de carácter interdisciplinario

CG4.- Trabajo en un contexto internacional

CG5.- Aprendizaje y trabajo autónomos

CG6.- Capacidad de aplicar los conocimientos teóricos en la práctica

CG7.- Capacidad de elaboración y transmisión de ideas, proyectos, informes, soluciones y problemas

CG8.- Capacidad de organización y planificación

CG9.- Capacidad de entender el lenguaje y propuestas de otros especialistas

Transversales

CT1.- Comunicación oral y escrita

CT2.- Conocimiento de lenguas extranjeras

CT3.- Capacidad de gestión de la información

CT4.- Habilidades en las relaciones interpersonales

CT5.- Trabajo en equipo

CT6.- Razonamiento crítico

CT7.- Creatividad

CT8.- Uso de Internet como medio de comunicación y fuente de información

Específicas

CE4.- Entender y valorar artículos científico-técnicos de revistas especializadas en cristalografía y cristalización

CE23.- Ser capaz de combinar datos procedentes de diferentes equipos experimentales

CE33.- Comprender los fundamentos de las técnicas de análisis de datos de difracción en polvo y saber utilizar los programas que las implementan

CE34.- Comprender los fundamentos metodológicos del refinamiento de Rietveld y saber utilizar los programas que lo implementan

PLAN DE APRENDIZAJE

Actividades formativas

AF1.- Clases presenciales activas: Combinación de teoría, problemas cortos, preguntas y discusión con los alumnos.

AF4.- Seminarios.

AF5.- Prácticas de computación y bases de datos.

AF6.- Tutoría individual o grupal.

AF7.- Evaluación.

AF8.- Clases prácticas en laboratorio.

AF9.- Planificación, realización y análisis de experimentos (tutelada).

AF10.- Trabajo autónomo.

AF11.- Visitas a empresa o centro de investigación.

AF12.- Trabajo en grupo.

Resultados de aprendizaje

Esta asignatura tiene como objetivo realizar un desarrollo inicial de las habilidades del alumno en la difracción de polvo y el método de Rietvel, proporcionándoles las herramientas informáticas (programas), los conocimientos iniciales y los asesores (los profesores del curso), para que cuando vuelvan a sus lugares de trabajo puedan continuar el proceso de aprendizaje.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

Descripción del sistema de evaluación

Sistema de evaluación (ponderación mínima y máxima %)

- Prueba escrita (0%-80%)
- Realización de prácticas y/o cuaderno de prácticas (0%-70%)
- Realización y presentación de trabajos e informes (0%-50%)
- Participación en seminarios (0%-30%)
- Participación en clase (0%-30%)

Calendario de exámenes

Asignatura no ofertada en el curso académico 2015-2016

PROFESORADO

Profesor responsable

Masciocchi , Norberto

*Catedrático de Química Inorgánica
Universita degli Studi dell'Insubria*

García Aranda, Miguel Ángel

*Profesor Titular de Química Inorgánica
Universidad de Málaga*

Profesorado

Profesor Responsable de la asignatura

BIBLIOGRAFÍA Y ENLACES RELACIONADOS

Bibliografía

El método de Rietveld. Editor: Esteve, V. (ed). Publicacions de la Universitat Jaume I. Castellón. (2006).

The Rietveld Method. Young, R. A. (ed). Oxford University Press. Oxford. (1993).

X-ray Diffraction Procedures. H. P. Klug y L. E. Alexander, (2ª Edición), John Wiley & Sons, New York (1973).

Synchrotron Radiation Research. (ed.) H Winick. Perseus Books (1980).

Structural and chemical analysis of materials. X-rays, Electron and neutron diffraction. X-ray, electron and ion spectrometry, Electron microscopy. JP Eberhart. John Wiley & Sons, Inc. (1991).

Synchrotron Radiation and biophysics. (ed.) SS Hasnain. Ellis Horwood (1991).

Quantitative X-ray Diffractometry. L.S. Zevin y G. Kimmel, Springer, New York (1995).

Introduction to X-ray Powder Diffractometry. R Jenkins & RL Snyder. John Wiley (1996).

Characterization of Nanophase Materials. (ed.) Zhong Lin Wang. John Wiley (1999).

Structure Determination from Powder Diffraction Data. W.I. F. David, K. Shanklnad, L.B. McCuster y Ch. Baerlocher (Ed.) International Union of Crystallography. Monographs on Crystallography, nº 13. Oxford University Press. Oxford (2002).

Fundamentals of Crystallography (2nd ed.). C. Giacovazzo, H.L. Monaco, G. Altoli, D. Viterbo, G. Ferraris, G. Filli, G. Zanotti and M. Catti. Oxford Universtiy Press, (2002).

Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials. VK Pecharsky & PY Zavalij. Kluwer Academic Publishers (2003).

Structure Determination by X-Ray Crystallography. Mark Ladd y Rex Palmer, 4ª Edición, Kluwer Academic/Plenum. New York (2003).