

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

Dictado de curso de posgrado

| | | | | | |
|---|--|------------|-----|----------------------|--|
| Año | 2023 | Semestre | 2do | | |
| Indique la denominación del curso (actividad curricular) | | | | | |
| Método de Rietveld aplicado a Difracción de Rayos X de Polvos | | | | | |
| Especificación clara si se lo considera válido para cubrir exigencias del Doctorado | | | | | |
| Si. Ya ha sido aprobado con puntaje para el Doctorado. | | | | | |
| Indique el/las área/s de Doctorado para las que el curso es dirigido | | | | | |
| Cs. Biológicas | | Física | x | Ciencias Ambientales | |
| Química | x | Matemática | | | |
| Indique si el curso es o forma parte de una materia de grado. Especifique. | | | | | |
| No | | | | | |
| Profesor responsable (indicando cargo docente y/o investigación y las horas que participa del dictado de clases) | | | | | |
| Profa. María Susana Conconi | | | | | |
| Docentes participantes (indicando cargo docente y/o investigación y las horas que participa del dictado de clases) | | | | | |
| Lic. María Susana Conconi 20 hs (dictado) Lic. Matias R. Gauna – CONICET- UNLP – (8 hs) Dr. Ing. Matias Stabile- CONICET -UNLP (8 hs) Dr. Diego Richard -. CONICET -UNLP (4 hs) | | | | | |
| 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 te Teoria:15 hs Horas de Practica: 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 | | | | | |
| Ámbito o lugar de desarrollo (Instituto, Centro, Laboratorio, cátedra, aula, etc). Si hay más de uno indicar cuántas horas en c/u y qué actividades se desarrollarán en cada lugar | | | | | |
| Instalaciones del Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica (CETMIC) dependiente de UNLP, CONICET y CICPBA Camino Centenario y 506. Gonnet | | | | | |
| Comienzo del dictado | 11/9/23 | | Cupo de alumnos/as | 20 | |
| Breve descripción de los contenidos y su vinculación con los objetivos de la carrera (máx. 1000 caracteres) | | | | | |
| <p>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.</p> | | | | | |
| Arancelamiento | | | | | |
| NO | | SÍ | x | Monto | 2000\$ para alumnos, becarios y doctorandos de cualquier Universidad Nacional o personal del Sistema Científico. Beca total para tesistas de la Facultad de Cs Exactas UNLP \$ 30.000 para Profesionales de Empresas Privadas |
| Destino de los fondos | | | | Material impreso e insumos para descansos (Café, te Masas, azúcar) | |
| Mecanismo de pago y administrador de fondos | | | | A través de la Fundación Ciencias Exactas | |
| 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)

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.

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)

- 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

Si corresponde, describir las actividades prácticas previstas, indicando lugar donde se desarrollarán, modalidad de supervisión y modalidades de evaluación (máx. 2000 caracteres).

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.

Si el curso incluye horas a distancia indicar las previsiones metodológicas y pedagógicas, las actividades que se realizarán en las horas presenciales y en las virtuales y el modo en que se articularán, las interacciones docente-estudiantes y estudiantes-estudiantes previstas, y los mecanismos de seguimiento, supervisión y evaluación de esas actividades.

No aplica

Contacto con el responsable

| | |
|------------------|--|
| Lugar de Trabajo | Centro de Tecnología de Recursos Minerales y Cerámica – CETMIC |
|------------------|--|

| | |
|----------|----------------------------|
| Teléfono | 0221 484-0247/0167 int 101 |
|----------|----------------------------|

| | |
|--------------------|------------------------------|
| Correo electrónico | msconconi@cetmic.unlp.edu.ar |
|--------------------|------------------------------|

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.

6- Aplicaciones en ciencia de materiales. Introducción a otros programas

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. Louër, 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>