

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	<input type="checkbox"/>	Física	<input checked="" type="checkbox"/>
Química	<input checked="" type="checkbox"/>	Matemática	<input type="checkbox"/>
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, azucar)	
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>