

## Análisis de patrones de difracción de Rayos X de polvos por el método de Rietveld utilizando el software **FullProf**

<b>MODALIDAD:</b>	Presencial.
<b>DIRIGIDO A:</b>	Estudiantes y profesionales que desarrollan investigaciones relacionadas con la ciencia de materiales.
<b>OBJETIVO:</b>	El refinamiento de estructuras cristalinas es una técnica que permite realizar análisis cuantitativos a partir de patrones de difracción de Rayos X, es posible cuantificar parámetros micro-estructurales y cristalográficos. El alcance del curso consiste en comprender los fundamentos del método de Rietveld y aprender a emplear la técnica con el software de libre distribución FullProf
<b>COORDINADOR ACADÉMICO:</b>	M.C. Manuel Aguilar Franco
<b>DURACIÓN:</b>	20 horas.
<b>REQUISITOS DE ACREDITACIÓN:</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Acreditar los módulos con una calificación mínima de 8.0</li> <li>• Cumplir con un mínimo del 85% de asistencia</li> <li>• Presentar y acreditar con un mínimo de 8.0</li> </ul>
<b>REQUERIMIENTOS TÉCNICOS:</b>	- Conocimientos básicos de difracción de Rayos X de polvos y computadora personal con SO Windows y/o Mac OS.
<b>SEDE:</b>	ENES, Morelia, Michoacán
<b>FECHA DE ELABORACIÓN:</b>	1 de junio de 2016.

### PROGRAMA

#### Clase 1. Lunes 27 de junio

0. Instalación del código para refinar estructuras cristalinas
  - 0.1 Instalación de FULLPROF
  - 0.2 Instalación de PowdII Converter
  - 0.3 Probar el funcionamiento de los softwares instalados
1. Métodos para hacer un análisis cuantitativo de un patrón de difracción.
2. Esencia del Método de Rietveld para refinar estructuras cristalinas.
  - 2.1 Demo de un refinamiento completo
3. Contribuciones en un patrón de difracción de rayos X de polvos.
  - 3.1 Escala entre el modelo y el experimento
  - 3.2 Arreglo experimental
  - 3.3 Fondo
  - 3.4 Muestra
  - 3.5 Polarización de los rayos X
4. Códigos para refinar estructuras cristalinas empleando el método de Rietveld.
  - 4.1 Descripción de FULLPROF.
  - 4.2 Demo de un refinamiento completo.

### **Clase 2. Martes 28 de junio**

5. Refinamiento empleando el código FULLPROF.
  - 5.1 Lectura de patrones de difracción.
  - 5.2 Definición de la escala
  - 5.3 Modelado del fondo en los patrones de difracción de rayos X
  - 5.4 Modelado del perfil de los picos de difracción.
6. Arreglo experimental. Modelo para la óptica mediante trazado de rayos.
  - 6.1 Fuente de rayos X
    - 6.1.1 Modelado de la fuente de rayos X
  - 6.2 Óptica del haz primario (haz incidente)
  - 6.3 Óptica del haz secundario (haz difractado)
  - 6.4 Difractómetro
  - 6.5 Detector

### **Clase 3. Miércoles 29 de junio**

7. Contribución de la muestra al patrón de difracción
  - 7.1 Polarización de los rayos X
  - 7.2 Fases cristalinas
8. Ensanchamiento de los picos de difracción
  - 8.1 Microestructura
    - 8.1.1 Tamaño promedio de cristal
    - 8.1.2 Microdeformaciones
    - 8.1.3 Distribución de tamaño de cristal
9. Vibraciones de los átomos
10. Orientación preferencial

### **Clase 4. Jueves 30 de junio**

11. Refinamiento de una muestra con varias fases.
  - 11.1 Determinación de la concentración de las fases.
12. Transparencia a los rayos X
13. Modelado de fases amorfas

### **Clase 5. Viernes 1 de julio**

14. Obtención de las longitudes de enlace después de refinar
15. Gráfica representativa de un refinamiento de Rietveld.
16. Reporte de la cristalografía generada.
17. Elaboración del reporte de un refinamiento de Rietveld.