



Universidad de La Ciénega del
Estado de Michoacán de Ocampo

Ficha técnica de materias optativas

Nombre del curso: REFINAMIENTO POR EL MÉTODO DE RIETVELD
Docente: César Shimizu Durán
Día y horario:
Cupo máximo: 15
Criterios de inscripción (si aplica): Haber cursado “Estructura Reticular y Molecular”
Conceptos básicos: DIFRACCIÓN DE RAYOS-X, SIMETRÍA, ESTRUCTURA, CELDA UNITARIA, CRISTALOGRAFÍA, ANÁLISIS CUALITATIVO, ANÁLISIS CUANTITATIVO, REFINAMIENTO DE ESTRUCTURAS CRISTALINAS, MÉTODO DE RIETVELD
Justificación: El Método de Rietveld es una técnica analítica fundamental en el campo de la ciencia de materiales y la nanotecnología, ya que permite el refinamiento de estructuras cristalinas a partir de datos obtenidos por difracción de rayos X. Este curso responde a la necesidad de formar profesionales capaces de interpretar y analizar patrones de difracción con el objetivo de describir las propiedades cristalográficas de materiales avanzados. El conocimiento adquirido en este curso permitirá a los estudiantes diseñar experimentos, procesar datos y aplicar el método a problemas reales, contribuyendo al desarrollo de la investigación y la innovación tecnológica.
Objetivo general: Que el alumno sea capaz de comprender los fundamentos del Método de Rietveld y aprender a emplear la técnica con el software de libre distribución FullProf, con los cuales podrá realizar la descripción de las propiedades del material de bajo estudio.
Objetivos específicos: Aplica los fundamentos teóricos de la difracción de rayos x y la cristalografía para identificar sólidos cristalinos y construir modelos estructurales Conoce los fundamentos teóricos de la técnica de refinamiento de estructuras cristalinas por el Método de Rietveld y sus aplicaciones prácticas Identifica los parámetros de refinamiento tanto instrumentales como cristalográficos Diseña un archivo *.pcr para refinamiento Identifica las contribuciones de la muestra cristalina para el ensanchamiento de los picos de difracción y sus parámetros de refinamiento Diseña un archivo *.pcr que incluya los parámetros de refinamiento de las microdeformaciones y tamaño de cristal Diseña un archivo *.pcr para una muestra con mezcla de fases Calcula el porcentaje de fases en una muestra a partir de los archivos de refinamiento Analiza los datos resultantes de los archivos de refinamiento para generar un reporte Construye una gráfica representativa de un refinamiento Rietveld
Método de trabajo: Clases teóricas: Se abordarán los conceptos básicos relacionados con la difracción de rayos X, cristalografía y el Método de Rietveld.

Sesiones prácticas: Uso del software FullProf para el refinamiento de estructuras cristalinas.

Trabajo individual y en equipo: Los estudiantes realizarán ejercicios prácticos y resolverán casos de estudio basados en datos experimentales.

Proyectos: Cada estudiante desarrollará un proyecto individual donde deberá refinar una estructura cristalina específica, interpretar los resultados y generar un informe técnico.

Asesorías personalizadas: El docente estará disponible para resolver dudas específicas y apoyar en el desarrollo de los proyectos

Criterios de evaluación:

Participación activa en clase: 10%

Asistencia puntual y participación en discusiones teóricas y prácticas.

Ejercicios prácticos: 30%

Resolución de ejercicios propuestos durante las sesiones prácticas.

Examen teórico: 20%

Evaluación de los conceptos fundamentales del curso.

Proyecto final: 40%

Calidad del refinamiento realizado.

Análisis e interpretación de los resultados.

Presentación del informe técnico y gráfica representativa.

Temario:

1 Difracción de Rayos-X Introducción

2 Refinamiento de estructuras cristalinas

3 Contribuciones de un patrón de difracción

Ensanchamiento de los picos de difracción

Refinamiento de una muestra con varias fases

6 Información de ficheros de refinamiento

Bibliografía básica:

R.A. YOUNG. The Rietveld Method. OXFORD University Press. 1993

L. FUENTES. Introducción al Método de Rietveld. Sociedad Mexicana de Cristalografía A.C.2004

L. FUENTES.La Relación Estructura-Simetría-Propiedades en Cristales y policristales. Reverté. 2008