

## Formación Continua

2020-2021

- **La Difracción de Rayos X.  
Introducción al Análisis  
de Difractogramas**  
*(1 edición)*



### Información

Teléfono: 954 55 97 47

Web: <http://www.citius.us.es>

Email: [areaderayosx@us.es](mailto:areaderayosx@us.es)



<https://cfp.us.es>

UNIVERSIDAD DE SEVILLA

# Datos básicos

**Número de créditos:** 34,00 horas

**Preinscripción:** A partir del 01/11/2020

**Matrícula:** A partir del 01/12/2020

**Impartición:** Del 01/02/2021 al 05/02/2021

**Precio (euros):** 360,00 (tasas incluidas)

**Modalidad:** Presencial

**Lugar de impartición:** Aula TIC2

**Horario:** Lunes a viernes, en horario de mañana y tarde.

**Procedimientos de Evaluación:** Asistencia, Trabajos

## Dirección

**Unidad Organizadora:**

Centro de Investigación Tecnológica e Innovación (C.I.T.I.U.S.)

**Director de los estudios:**

D. Joaquín Ramírez Rico

## Requisitos

Este curso está dirigido a cualquier persona interesada, pero especialmente a investigadores, técnicos y alumnos universitarios que tengan relación con la difracción de rayos X.

**Criterios de selección de alumnos:** Orden de preinscripción.

## Objetivos

Ese curso se oferta dado el interés de los usuarios del Servicio de Investigación "SGI Laboratorio de Rayos X" en el conocimiento y manejo del software de tratamiento de datos obtenidos por difracción de rayos X. El principal objetivo del curso es posibilitar que el alumnado adquiera una formación inicial en distintas técnicas instrumentales utilizadas en las medidas de difracción de Rayos X, así como formarlos para la interpretación cualitativa y cuantitativa de los diagramas de difracción.

El curso incluye técnicas de interpretación cualitativa de los diagramas de difracción de rayos X, incluyendo el manejo de aplicaciones informáticas que permiten el empleo de bases de datos cristalográficas para la detección de fases cristalinas, así mismo realización de análisis cuantitativo de las diferentes fases halladas mediante el empleo de procedimientos estandarizados de cálculo y la introducción al alumno en el manejo de software DIFFRAC.EVA.

Este curso incluye el manejo del software DIFFRAC.TOPAS. Se formará al alumno en el análisis de difractogramas mediante la aproximación de parámetros fundamentales (métodos de Pawley y Le Bail), análisis microestructural, método Rietveld y análisis cuantitativo de fases cristalinas y amorfas usando DIFFRAC.TOPAS.

## Comisión Académica

D. Joaquín Ramírez Rico. Universidad de Sevilla - Física de la Materia Condensada

D<sup>a</sup>. Patricia Aparicio Fernández. Universidad de Sevilla - Cristalografía, Mineralogía y Química Agrícola

D. Santiago Medina Carrasco. - SGI Laboratorio de Rayos X. CITIUS

## Profesorado

D. Santiago Medina Carrasco. - SGI Laboratorio de Rayos X. CITIUS

D. Joaquín Ramírez Rico. Universidad de Sevilla - Física de la Materia Condensada

D. Francisco Rodríguez Padial. - SGI Laboratorio de Rayos X. CITIUS

# Asignaturas del Curso

## Módulo/Asignatura 1. Teoría

Número de créditos: 14 horas

### Contenido:

- Fundamentos de la Difracción de Rayos X. Interacción de la radiación con la materia. Producción de Rayos X. Métodos de difracción de Rayos X. Factores que afectan a la intensidad de los Rayos-X difractados.
- Estrategias para la adquisición de datos. Medida y evaluación de errores. Procedimientos generales de reducción de datos.
- Introducción al análisis cuantitativo de fases cristalinas.
- Ajuste de perfiles. La aplicación DIFFRAC.TOPAS.
- Parámetros de pico. Fundamentos y definiciones. Funciones analíticas.
- Análisis basados en modelos no estructurales. Ajuste de picos puntuales. Ajuste de un grupo de picos.
- Aproximación de parámetros fundamentales. Descomposición de diagramas. Ajuste de parámetros de red.
- Análisis microestructural.
- Refinamiento estructural mediante el Método Rietveld. I.- Intensidad de los picos: orígenes y fundamentos.
- Refinamiento estructural mediante el Método Rietveld. II.- Análisis Rietveld con el programa Topas.
- Análisis cuantitativo de fases mediante el método Rietveld.

**Fechas de inicio-fin:** 01/02/2021 - 05/02/2021

## Módulo/Asignatura 2. Práctica

Número de horas: 15,00 Horas

### Contenido:

- Montaje de muestras en difractorio de Rayos X.
- Estrategias para la adquisición de datos. Medida y evaluación de errores. Procedimientos generales de reducción de datos.
- Análisis cualitativo de fases cristalinas. Desarrollo de rutinas de evaluación.
- Manejo y mantenimiento de bases de datos PDF (Powder Diffraction File). Manipulación de bases de datos ICCD con formatos PDF2, PDF4 y COD (Crystallography Open Database). Creación y empleo de bases de datos por el usuario.
- Introducción al análisis cuantitativo de fases cristalinas.
- Análisis microestructural.
- Refinamiento estructural mediante el Método Rietveld. II.- Análisis Rietveld con el programa DIFFRAC.TOPAS.
- Análisis cuantitativo de fases mediante el método Rietveld.

**Fechas de inicio-fin:** 01/02/2021 - 05/02/2021

## Módulo/Asignatura 3. Uso de equipos

Número de horas: 5,00 Horas

### Contenido:

- Visita al SGI Laboratorio de Rayos X.
- Montaje de muestras en difractorio de Rayos X.
- Apoyo en clases prácticas

**Fechas de inicio-fin:** 01/02/2021 - 05/02/2021