

## XIII ESCUELA SOBRE EL MÉTODO DE RIETVELD

Castellón, 1–4 de Julio de 2013

El método de Rietveld es una potente herramienta para la obtención de información estructural, microestructural y el análisis cuantitativo de fases a partir de difractogramas de polvo. Durante los últimos quince años, el Método de Rietveld ha jugado un papel crucial en casi todas las áreas más punteras de la investigación en nuevos materiales. Ha sido ampliamente utilizado en el estudio de superconductores de alta temperatura, siendo clave en el desarrollo de la química del estado sólido de los fullerenos y en el de las cerámicas con coeficientes de dilatación negativos. Además, se ha usado en miles de estudios estructurales de óxidos metálicos con utilidad como catalizadores, zeolitas, arcillas, minerales, medicamentos, materiales biológicos e incluso polímeros.

El análisis cuantitativo de fases por el método de Rietveld es en la actualidad especialmente importante, utilizándose, entre otros, en la resolución de problemas ambientales, el análisis de minerales y en la industria petroquímica.

En la presente edición de la Escuela, además de los ajustes básicos, se realizará una introducción a los métodos *ab initio* de determinación de estructuras cristalinas y a la difracción de rayos X sincrotrón

### DIRECTORES DEL CURSO

- Dr. Vicente Esteve Cano, profesor de Química Inorgánica del Departamento de Química Inorgánica y Orgánica de la Universidad Jaume I.
- Dr. Miguel Angel García Aranda, profesor de Química Inorgánica del Departamento de Química Inorgánica y Cristalografía de la Universidad de Málaga
- Dra. María Angeles Tena Gómez, profesora de Química Inorgánica del Departamento de Química Inorgánica y Orgánica de la Universidad Jaume I.

### PROFESORADO

- Prof. Dr. Jordi Rius (Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona, CSIC).
- Prof. Dr. Santiago García Granda (Universidad de Oviedo).
- Prof. Dr. José Luis Pizarro (Universidad del País Vasco)
- Prof. Dr. Miguel Angel García Aranda (Universidad de Málaga).
- Prof. Dr. Aurelio Cabeza (Universidad de Málaga)
- Dr. Carlos Frontera (Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona, CSIC).
- Dr. Xavier Alcobé (Centres Científics i Tecnològics, Universitat de Barcelona).

### ESTRUCTURA Y DOCUMENTACIÓN DEL CURSO

Las clases de teoría se impartirán por la mañana. En sesiones de entre 1 y 2 horas de duración con un descanso de 30 minutos.

Las clases prácticas, tuteladas, y en las que cada estudiante dispondrá de un ordenador tipo PC, tendrán lugar por la tarde.

Las comidas serán conjuntas para profesores y alumnos de la Escuela.

Al matricularse, todos los alumnos recibirán una clave para acceder y descargar, tanto la documentación del curso como los programas a utilizar y los ficheros con los ejemplos, a través de su aula virtual.

Tanto las clases como la documentación entregada lo serán en castellano. Así mismo, se entregará a todos los alumnos el libro "El método de Rietveld", del que estamos preparando su segunda edición.

Aquellos alumnos interesados pueden remitir, con la adecuada antelación, vía correo electrónico, sus propios problemas para ser estudiados/resueltos durante el curso.

### HORARIO Y LUGAR DE CELEBRACIÓN

El horario de la Escuela será de 9:30 h a 18:30 h. Las clases se impartirán en la Escuela Superior de Tecnología y Ciencias Experimentales de la Universidad Jaume I de Castellón.

### DESPLAZAMIENTO Y ALOJAMIENTO

El desplazamiento hasta Castellón y el alojamiento corren a cargo de los participantes, no estando incluidos en la cuota de inscripción. Castellón, al ser una ciudad turística, dispone de una amplia oferta hotelera.

La Universidad Jaume I dispone de una Residencia Universitaria, inaugurado el año 2002, en el mismo Campus en el que se celebra la Escuela

### LÍMITE DE ADMISIÓN Y REQUISITOS DE INSCRIPCIÓN

Podrán participar en el curso un máximo de 29 estudiantes. Los alumnos del curso deberán ser estudiantes de 3<sup>er</sup> ciclo, licenciados o doctores en titulaciones de Química, Física, Geología o afines. La admisión tendrá lugar por riguroso orden de inscripción, utilizándose como criterio complementario la máxima distribución geográfica del alumnado por comunidades autónomas.

### INSCRIPCIÓN

El boletín de preinscripción se deberá remitir cumplimentado **antes del 27 de Mayo** de 2013, preferentemente por correo electrónico, a la siguiente dirección:

Prof. Vicente Esteve Cano  
Departamento de Química Inorgánica y Orgánica.  
Universidad Jaume I  
Campus de Riu Sec  
12071 Castellón  
E-mail: [vicente.esteve@uji.es](mailto:vicente.esteve@uji.es)  
Fax: 964 72 82 14. Tel.: 964 72 82 46.

El importe previsto de la cuota de inscripción es de 350 euros para todos los participantes. Está prevista la dotación de un pequeño número de becas de inscripción para los estudiantes de 2<sup>o</sup> y 3<sup>er</sup> ciclos vinculados a los Grupos Especializados que patrocinan las Escuela. Esta misma información y la complementaria que vaya produciéndose puede encontrarse en [www3.uji.es/~estevev](http://www3.uji.es/~estevev)

Las cuotas de inscripción incluyen la participación en las sesiones teóricas y prácticas del curso, la documentación del mismo, los ficheros de ejemplos, los almuerzos de trabajo, y el diploma de asistencia.

En la **segunda circular, que se enviará la primera semana de Junio** a todas aquellas personas que hayan formalizado la preinscripción, se informará con detalle sobre las reservas.

## XIII ESCUELA SOBRE EL MÉTODO DE RIETVELD

Castellón, 1 - 4 de Julio de 2013

### BOLETIN DE PREINSCRIPCION

**NOMBRE Y APELLIDOS:**

**GRADO ACADEMICO:**

**INSTITUCIÓN:**

**DIRECCION:**

**CIUDAD: CODIGO**

**POSTAL: TELEFONO:**

**FAX:**

**E-MAIL:**

**¿SOLICITA BECA? SI 0 NO 0**

**¿A QUÉ GRUPO ESPECIALIZADO PERTENECE?**

Cumplimenta esta solicitud y envíala a:

Prof. Vicente Esteve Cano  
Departamento de Química Inorgánica y Orgánica.  
Universidad Jaume I.  
Campus de Riu Sec  
12071 Castellón de la Plana  
Fax: 964 72 82 14  
Tel.: 964 72 82 46  
**e-mail:** Vicente.esteve@uji.es

### Escuela sobre el método de Rietveld

Programa (lunes 4 a jueves 7 de julio)

#### Lunes

*Mañana*

**T1.-** Materia cristalina y difracción de polvo.

**T2.-** Indexación de difractogramas de polvo.

**T3.-** Fundamentos del Método de Rietveld.

*Tarde*

**P1.-** Práctica de indexación con DICVOL04 y otros programas incluidos en WinPLOTR/Fullprof.

#### Martes

*Mañana*

**T4.-** Introducción a la difracción de rayos X sincrotrón.

**T5.-** Estrategias de afinamiento y descripción detallada del perfil.

**T6.-** Introducción al análisis microestructural a partir de datos de difracción de alta resolución.

**T7.-** Introducción a la determinación de estructuras cristalinas *ab-initio* a partir de datos de polvo: (I) Extracción de intensidades integradas, descripción de los índices residuales y análisis del grupo espacial (DAJUST software).

*Tarde*

**P2.-** Prácticas con ordenador y programa FULLPROF: (1) Afinamiento del perfil sin modelo estructural.

**P3.-** Prácticas con ordenador y programa FULLPROF: (2) afinamiento monofásico simple.

#### Miércoles

*Mañana*

**T8.-** Teoría de métodos directos de resolución para difracción de polvo (XLENS software).

**T9.-** Completado del modelo estructural y afinamiento con restricciones geométricas.

**T10.-** Preparación de muestras y condiciones de medida.

**T11.-** Análisis de Rietveld multifásico (cuantitativo y extracción de intensidades en presencia de más de una fase).

*Tarde*

**P4.-** Prácticas con ordenador. Prácticas: Con el ejemplo del día anterior, uso combinado DAJUST y XLENS para la resolución estructural seguido del afinamiento con restricciones con FULLPROF.

#### Jueves

*Mañana*

**T12.-** Bibliotecas de programas y de estructuras.

**P5.-** Prácticas de Análisis cuantitativo por el método de Rietveld. Ejemplos con cuantificación de material no difractante.

**P6.-** Práctica de resolución estructural completa: 1) determinación de grupo espacial y extracción de intensidades con DAJUST; 2) resolución de la estructura con XLENS; 3) afinamiento de Rietveld con FULLPROF.

*Tarde*

**P7.-** Prácticas. Afinamiento Rietveld de muestras complejas (datos radiación sincrotrón).

Clausura y entrega de becas y certificados.

## XIII ESCUELA SOBRE EL MÉTODO DE RIETVELD



Castellón, 1 a 4 de julio de 2013

#### ORGANIZAN

- Departamento de Química Inorgánica y Orgánica de la Universidad Jaume I
- Departamento de Química Inorgánica y Cristalografía de la Universidad de Málaga

#### PATROCINAN

- Grupo Especializado de Cristalografía
- Grupo Especializado de Química del Estado Sólido y Materiales
- Panalytical, S.A.