

PROGRAMA: La difracción de rayos x. Introducción al análisis de difractogramas

I. Introducción a la Difracción de Rayos X (1,5 h)

- I.1. Estrategias para la adquisición de datos. Medida y evaluación de errores.
- I.2. Procedimientos generales de reducción de datos

II. Análisis cualitativos de los diagramas de difracción de Rayos X (2 h)

- II.1. Análisis cualitativo de fases cristalinas.
- II.2. Desarrollo de rutinas de evaluación.

III. Bases de datos cristalográficas (2 h)

- III.1. Manejo y mantenimiento de bases de datos PDF (Power Diffraction Files).
- III.2. Manipulación de la base de datos ICCD con formatos PDF-2 y PDF-4.
- III.3. Creación y empleo de bases de datos definidas por un usuario.
- III.4. Importación y exportación de datos. Tipos de formatos.

IV. Análisis cualitativos de los diagramas de difracción de Rayos X (3 h)

- IV.1. Introducción al análisis cuantitativo de fases cristalinas.
- IV.2. Medidas de difracción de Rayos X en el equipo D8I
- IV.3. Métodos de regresión. Chung I y Chung II.
- IV.4. Introducción a la aplicación DQUANT.
- IV.5. Análisis de fases cuantitativas automatizadas.
- IV.6. Interpretación de resultados del análisis cuantitativo.

V. Refinamiento de perfiles de DRX (4 h)

- V.1. Introducción a paquetes informáticos de refinamiento.
- V.2. El paquete TOPAS: Introducción al ajuste de perfiles.
- V.3. Ajuste analítico de perfiles.
- V.4. Aproximación fundamental de parámetros.
- V.5. Introducción al tamaño promedio de cristal
- V.6. Análisis de microtensiones.
- V.7. El método Rietveld.
- V.8. Análisis de fases cuantitativo usando TOPAS y GSAS.