

VI ESCUELA SOBRE EL MÉTODO DE RIETVELD

Castellón, 3-6 de Julio de 2006

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.

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. José María Amigó (Universidad de Valencia)
- Prof. Dr. Daniel Louër (CNRS, Rennes)
- Prof. Dr. Jordi Rius (Instituto de Ciencia de Materiales de Barcelona, CSIC).
- Prof. Dr. Santiago García Granda (Universidad de Oviedo)
- 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)
- D. Xavier Alcobé (Servicios Científico-Técnicos, Universidad 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 comienzo del curso, todos los alumnos recibirán la documentación escrita (impresa en papel) del mismo, así como un pen-drive que contendrá tanto el texto entregado en papel como los programas a utilizar y los ficheros con los ejemplos.

Tanto las clases como la documentación entregada lo serán en castellano (excepto la clase teórica del profesor Louër, que será en inglés, si bien el profesor podrá recibir y contestar preguntas en castellano).

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 18:00. 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, si bien, como en años anteriores, se están negociando con agencias de viajes y hoteles reducciones de precios para los participantes.

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 28 estudiantes. Los alumnos del curso deberán ser estudiantes de 3^{er} 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 31 de Mayo** de 2006, preferentemente por correo electrónico, a la siguiente dirección:

Prof. M^a Angeles Tena Gómez
Departamento de Química Inorgánica y Orgánica.
Unidad Jaume I
Campus de Riu Sec
12071 Castellón
E-mail: tena@qio.uji.es
Fax: 964 72 82 14. Tel.: 964 72 82 49.

El importe previsto de la cuota de inscripción es de 325 euros para todos los participantes. Está prevista la dotación de un pequeño número de becas de inscripción para los estudiantes de 2^o y 3^{er} ciclos vinculados a los Grupos Especializados que patrocinan la Escuela. Esta misma información y la complementaria que vaya produciéndose puede encontrarse en www4.uji.es/~al066296 y www3.uji.es/~estevev

Las cuotas de inscripción incluyen la participación en las sesiones teóricas y prácticas del curso, la documentación del mismo, un pen-drive con el software a utilizar, 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.

**VI ESCUELA SOBRE EL
MÉTODO DE RIETVELD**

Castellón, 3-6 de Julio de 2006

BOLETIN DE PREINSCRIPCION

NOMBRE Y APELLIDOS:

GRADO ACADÉMICO:

INSTITUCIÓN:

DIRECCION:

CIUDAD:

CODIGO POSTAL:

TELEFONO:

FAX:

E-MAIL:

¿SOLICITA BECA? SI • NO •

¿A QUÉ GRUPO ESPECIALIZADO PERTENECE?

Cumplimenta esta solicitud y envíala a:

Dra. M^a. Angeles Tena Gómez
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 49
e-mail: tena@qio.uji.es

Escuela sobre el método de Rietveld

Programa (lunes 3 al jueves 6 de julio)

Lunes

Mañana

T1.- Fundamentos de la difracción de polvo de rayos X de laboratorio.

T2.- Indexación.

T3.- Fundamentos del Método de Rietveld.

Tarde

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

P2.- Instalación del programa GSAS y ejecución de un afinamiento monofásico sencillo (datos CuKa1,2).

Martes

Mañana

T4.- Significado de los índices de acuerdo en el Método de Rietveld.

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

T6.- Análisis cuantitativo por el método de Rietveld.

Tarde

P3.- Afinamiento de una muestra compleja (orientación preferente, ensanchamiento anisotrópico, etc.) con el programa GSAS y datos CuKa1.

P4.- Análisis cuantitativo de una mezcla patrón. (programa GSAS).

Miércoles

Mañana

T6.- Bibliotecas de programas y de estructuras.

T7.- Preparación de muestras y condiciones de medida

Tarde

P5.- Instalación del programa FULLPROF y ejecución de un afinamiento monofásico (datos CuKa1,2).

Jueves

Mañana

P6.- Análisis cuantitativo de fases de una mezcla que contiene fase amorfa. (Programa FULLPROF).

P7.- Afinamiento de muestras complejas con el programa FULLPROF (datos CuKa1,2 y CuKa1).



**VI ESCUELA SOBRE EL
MÉTODO DE RIETVELD**



Castellón, 3-6 de Julio de 2006

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.
- Bruker Española, S.A.