



## PRIMERA ESCUELA DE FULLPROF MÉXICO

La Universidad Politécnica de Pachuca, en el marco del Simposio Iberoamericano Multidisciplinario de Ciencias e Ingenierías (SIMCI 2017) tiene el honor de abrir sus puertas a la primera escuela de **FullProf** en México, la cual será impartida por el **Dr. Juan Rodríguez Carvajal**, creador de **FullProf Suite** y referente a nivel mundial en el procesamiento de datos a partir de difracción de rayos-X y difracción de Neutrones.

### Objetivo

FPSchool tiene como objetivo contribuir a la formación de científicos en el tratamiento de difracción de rayos-X y neutrones. La escuela se basa en sesiones prácticas intensivas utilizando los programas de la Suite FullProf. Las conferencias y tutoriales proporcionarán las herramientas esenciales necesarias para un uso eficiente del programa en un nivel intermedio. Además de las aplicaciones generales, se prestará especial atención a las nuevas características del análisis de datos de ciencias de los materiales y la determinación y refinamiento de la estructura magnética.

El curso comprende módulos teóricos y prácticos para las cuales cada participante debe contar con su propia computadora.

### Participantes

La escuela está destinada a estudiantes de posgrado y científicos experimentados con conocimientos básicos sobre técnicas de difracción y cristalografía, así como a la industria farmacéutica y cementera, entre otras. Para quienes se consideren principiantes se recomienda leer el manual FullProf con antelación.

El número máximo de participantes está limitado a 35, lo que garantiza la calidad de la formación impartida, para lo cual, habrá una selección de candidatos basada en su carta de motivación y CV (además de una carta de recomendación del director de tesis para los estudiantes de posgrado), tomando en cuenta el equilibrio entre las diversas instituciones y empresas participantes.



## PROGRAMA

### Domingo 17 de Septiembre de 2017

#### **15:00-18:00 h. Instalación de software y archivos de trabajo.**

Sesión básica de FullProf para principiantes.

Dr. Gilgamesh Luis Raya (UPPahuca) y Dr. Màrius Ramàrquez Cardona (UAEH).

### Lunes 18 de Septiembre de 2017

#### **08:00 - 9:00 h. Registro**

**09:00 -10:00 h.** Presentación de la Escuela por Juan Rodríguez-Carvajal, Gilgamesh Luis y Màrius Ramàrquez. Introducción general a los programas de la Suite FullProf. Sitio web: descarga de la suite y programas individuales. El uso de la barra de herramientas FPS para acceder a los programas. Consultar los manuales y la documentación, etc.

**10:00 - 11:30 h.** WinPLOT (visualización de patrones de difracción, detección de picos y ajuste de picos, exportación del fondo, visualización de gráficos en 3D, detectores 2D, etc.)

#### **11:30 - 12:00 h. Coffee Break**

**12:00 - 12:30 h.** Patrones de difracción de polvos de indexación (con los programas de indexación: DICVOL04, TREOR-90, etc.).

**12:30 - 14:15 h.** Determinación estructural ab-initio mediante difracción en polvo. Métodos directos, métodos de Fourier, *Charge flipping*, métodos de espacio real (Monte Carlo y *Simulated Annealing*).

#### **14:30 - 16:00 h. Comida**

#### **19:30 - 22:30 h. Recepción de bienvenida. Piscina del Hotel.**

### Martes 19 de Septiembre 2017

**09:00 - 10:15 h.** Introducción a la descripción matemática de los patrones de difracción en polvo. Formas de Pico. Contribución de la muestra al ensanchamiento de los picos de difracción (microestructura). Breve introducción al método Rietveld. Modelos estructurales: las expresiones de los factores estructurales en el caso de estructuras cristalinas simples y estructuras magnéticas. Análisis cuantitativo en muestras con mezcla de fases.

#### **10:15 - 10:45 h. Coffee Break**



**10:45 - 12:30 h. Sesión práctica**

Ejercicios propuestos: Introducción a WinPLOTR, Convertir-CIF a PCR, Función de resolución instrumental CW.

**12:30 - 13:30 h.** Estrategia para los refinamientos de Rietveld: una visión general desde la adquisición de datos hasta un proceso de datos completo usando la suite FullProf.

**13:30 - 15:00 h. Comida**

**15:00 - 16:00 h. Sesión práctica**

Ejercicios propuestos: Determinación de la estructura cristalina de  $Y_2O_3$

**16:00 - 16:30 h. Coffee Break**

**16:30 - 18:30 h. Sesión práctica.**

Ejercicio propuesto: refinamiento Rietveld de YBCO Co-dopado. Análisis cuantitativo de cosméticos del Egipto faraónico.

**Miércoles 20 de Septiembre de 2017**

**09:00 - 10:15 h.** Estudios microestructurales, desde fundamentos matemáticos, hasta ejemplos reales.

**10:15 - 10:45 h. Coffee Break**

**10:45 - 12:30 h. Sesión práctica.**

Ejercicio propuesto: refinamiento Rietveld de YBCO Co-dopado (continuación).

Estudio de los efectos microestructurales por difracción en polvo.

**12:30 - 14:00 h.** *Bond-Valence Energy-landscape*: trayectos de difusión de conducción iónica.

**14:00 - 15:30 h. Comida**

**15:30 - 16:00 h. Sesión práctica**

Ejercicios propuestos: Ejemplo de conducción iónica, *Simulated Annealing* en compuestos orgánicos.

**16:00 - 16:30 h. Coffee Break**

**16:30 - 18:30 h. Sesión práctica (continuación).**

Ejercicios propuestos: Ejemplo de conducción iónica, *Simulated Annealing* en compuestos orgánicos.

**20:00 - 23:00** Cena de recepción por parte de la Universidad Politécnica de Pachuca.

**Jueves 21 de Septiembre de 2017 Temas especializados**

**9:00 - 10:15 h.** Introducción a los refinamientos de los patrones de difracción de polvos en compuestos en capas: programa *Faults*.



**10:15 – 10:45 h. Coffee Break**

**10:45 - 12:30 h. Sesión práctica**

Ejercicios propuestos: Ejemplo de refinamiento de compuestos inorgánicos en capas. Estudio de los efectos microestructurales por difracción de polvos (continuación).

**12:30 - 15:00 h. Sesión interactiva**

A lo largo de esta sesión, se realizará una breve presentación para explicar/aclarar detalles específicos o para abordar dificultades o dudas generales (prácticas y/o teóricas). Dependiendo de la demanda de los asistentes, durante esta sesión también se pueden presentar herramientas útiles sobre otros temas, como estructuras magnéticas, modos de simetría, etc.

**15:00 - 16:30 h. Comida**

**17:30 - 19:00 h. Sesión interactiva (continuación).**

**19:00 – 20:00 h. Retroalimentación y sesión de clausura.**

**Viernes 22 de Septiembre de 2017**

**9:00 h.** Asistencia a conferencias en Simposio Iberoamericano Multidisciplinario de Ciencias e Ingenierías (SIMCI 2017), instalaciones de Tuzoforum.

**Conferencia magistral “Nuevos materiales para baterías. El papel de la difracción en la comprensión de los mecanismos de conducción e inserción.” del Dr. Juan Rodríguez Carvajal (Institut Laue-Langevin, Grenoble, Francia).**

**Entrega de constancias de curso.**

**Sede**

**Hotel Fiesta Inn**

Boulevard Luis Donaldo Colosio 2009,  
Ex-hacienda de Coscotitlán, 42064 Pachuca  
Dentro de Plaza Gran Patio Pachuca

**Informes e Inscripciones**

**Dr. Gilgamesh Luis Raya**  
**Psic. Patricia Briseño González**  
Universidad Politécnica de Pachuca  
Tel. (01 771) 547 75 10 ext. 2223/2204

**Dr. Màrius Ramírez Cardona**  
Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo  
Tel. (01 771) 71 72000 ext. 2271