



MINISTERIO
DE CIENCIA
E INNOVACIÓN



CSIC
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

icmm
Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid

Manual de operación de la Unidad de Apoyo de Difracción de Rayos X del ICMM

(Lab 025)

Por Fátima Esteban,

Página 1 | 22



Manual de operación de la Unidad de Apoyo de Difracción de Rayos X
del ICMM (Lab 025)

Índice

- 1. Como hacerse usuario de esta Unidad**
 - 1.1. Formación y documentación
 - 1.2. Acceso a la pizarra de reserva de uso de los difractómetros

- 2. Manual de Operación de los difractómetros D8 ADVANCE (BRUKER)**
 - 2.1. Tipos de difractómetros de polvo
 - 2.2. Preparación de muestra
 - 2.3. Operación de medida en los difractómetros de polvo D8 TT y D8 T2T
 - A. *Comprobación de que el equipo está operativo para el uso*
 - B. *Montaje de la muestra*
 - C. *Obtención del difractograma*
 - C.1. *Obtención del archivo de condiciones de medida dql*
 - C.2. *Lanzamiento de medida*
 - C.3. *Secuencia para parar una medida en traspaso*
 - C.4. *Transformación a otras extensiones del archivo de medida “.raw”*
 - 2.4. Operación de medida en los difractómetros D8 DaVinci
 - A. *Comprobación de que el equipo está operativo para el uso*
 - B. *Montaje de la muestra*
 - C. *Obtención del difractograma*
 - C.1. *Obtención del archivo de condiciones de medida bsml*
 - C.2. *Lanzamiento de medida*
 - C.3. *Transformación a otras extensiones del archivo de medida “.raw”*
 - 2.5. Como trasladar el archivo de medida a mi ordenador
 - 2.6. Tratamiento de Datos. Software EVA
 - 2.7. Como actuar en caso de incidencia o EMERGENCIA en uno de los difractómetros



Manual de operación de la Unidad de Apoyo de Difracción de Rayos X del ICMM (Lab 025 del ICMM)

Nota: El resto de información relevante que no se encuentra en este manual (personal responsable del servicio, tarifas...) puede verse en:

<https://www.icmm.csic.es/es/instituto/unidades-de-apoyo/index.php>

1. Como hacerse usuario de esta Unidad

1.1. Formación y documentación

Para llegar a ser usuario de la Unidad de Apoyo de Difracción de Rayos X (DRX) es necesario hacer el curso de formación sobre el uso de los difractómetros de polvo que posee la Unidad. Se solicitará escribiendo un email a la dirección rayos.x@icmm.csic.es

Una vez realizado, se deberá cumplimentar los siguientes documentos:

- Acreditación de que se ha recibido el curso y se conocen los peligros y precauciones de la técnica. Hay dos tipos, según si eres usuario del ICMM o externo.
- Normas de uso y aceptación de las mismas.

Pueden obtenerse en la página del ICMM:

<https://www.icmm.csic.es/es/instituto/unidades-de-apoyo/difraccion-de-rayos-x.php>

Una vez hayan sido cumplimentados y firmados digitalmente deben enviarse a rayos.x@icmm.csic.es. En caso de que alguna de las firmas no fuera digital, debe entregarse el documento original a Fátima Esteban (despacho 204).

1.2. Acceso a la pizarra de reserva de uso de los difractómetros de la Unidad

La pizarra de reserva de rayos x es una aplicación WEB donde se reserva el tiempo de uso de cada uno de los difractómetros. El tiempo reservado será el que se facturará como uso de difractómetro en la cuenta de proyecto que haya indicado el usuario. El tiempo máximo de uso por difractómetro, usuario y día es de dos horas. Si por el tipo de medida o experimento fuera imprescindible usarse más tiempo, la reserva solo podría ser realizada por el personal técnico, con el que habría que contactar.



Para hacerse usuario de la pizarra de reserva de tiempo de uso en los difractómetros es necesario, una vez realizado el curso, escribir un email a la dirección rayos.x@icmm.csic.es con la siguiente información:

Nombre del usuario

Dirección de email

Ubicación del lugar de trabajo

Teléfono de contacto para incidencias

Responsable

Cuenta de proyecto

Contraseña

La pizarra es una aplicación web a la que puedes acceder en el link:

<https://rayosx.icmm.csic.es>

Si accedes a la intranet desde fuera del ICMM hay que introducir doble contraseña, poniendo primero.

usuario: rayosx

Contraseña: icmm_20_rx

y luego tu usuario y contraseña.

2. Manual de Operación de los difractómetros de polvo D8 ADVANCE, BRUKER

En este manual solo se recogen los pasos básicos para conseguir un difractograma general de medida en los difractómetros de polvo de la Unidad y es complementario al curso de formación que debe recibirse para ser usuario.

2.1 Tipos de difractómetros de polvo.

Existen tres tipos de difractómetros de polvo en el Servicio de Difracción de Rayos X del ICMM:

- Difractómetro de polvo Bruker D8 Advance con radiación de Cu K α con detector PSD rápido (lynxeye). Es el que está situado al fondo del laboratorio 025 a la derecha según se entra y se le conoce como D8 TT.
- Difractómetro de polvo Bruker D8 Advance con radiación de Cu K α con monocromador secundario con detector de centelleo. Situado al fondo del Laboratorio 025 a la izquierda según se entra y se le conoce como D8 T2T.
- Difractómetro de polvo Bruker D8 Advance A25 con radiación de Cu K α con detector PSD-XE con Discriminación Positiva (DAVINCI). Es el difractómetro situado según se entra a la izquierda y se le conoce como D8 DaVinci.



2.2 Preparación de muestra

Debido a que el difractómetro está diseñado para el análisis de polvo policristalino, la muestra debe ser pulverizada ya que, el reducido tamaño nos aproxima bastante a la situación ideal, donde la orientación de los cristalitas sea totalmente al azar. La muestra, una vez en el portamuestra, debe someterse a un proceso de alisamiento superficial para evitar irregularidades, que impidan las condiciones de focalización que deben producirse (Ley de Bragg). Se deben tomar en cuenta que las muestras con distinta morfología pueden presentar variaciones en el difractograma debido a su textura, tamaño de grano y acomodo en el portamuestra.

Los portamuestras pueden ser cuadrados (5 cm de lado) o circulares (5 cm de diámetro) de vidrio, de aluminio, metacrilato o cuarzo etc con una depresión circular en el centro o sin ella. En el modo auto-servicio, es el usuario quien tiene que traer su propio portamuestras.

2.3 Operación de medida en los difractómetros de polvo D8 TT y D8 T2T

A. *Comprobación de que el equipo está operativo para el uso*

Cuando queremos usar un equipo es necesario realizar una serie de comprobaciones.

- Los indicadores de alta tensión deben estar encendidos (Figura 1).
- El shutter (obturador que impide la salida del haz de rayos X) debe estar cerrado (indicadores luminosos del tubo de rayos X iluminados en verde, Figura 2).
- La luz de alarma del panel de control debe estar apagada (Figura 3).
- El indicador "Ready" debe estar también iluminado (Figura 3).

En caso contrario, habría que avisar a los responsables técnicos.

Si hubiera una medida en marcha, el indicador amarillo "Busy" del panel de control estaría encendido (Figura 3). En este caso habría que esperar a que terminara y el usuario anterior retirara su muestra.



Figura 1. Difractómetro D8TT. Indicadores de alta tensión encendidos (enmarcados en rojo).

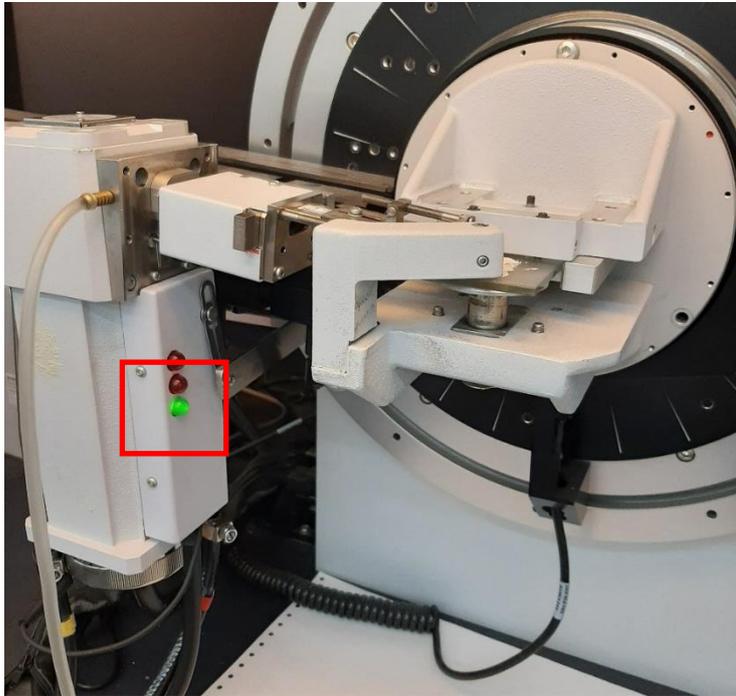


Figura 2. El indicador luminoso en verde del tubo de rayos X indica que el shutter está cerrado.



Figura 3. Paneles de control izquierdo y derecho de la cabina de trabajo del D8T2T solx.

B. Montaje de la muestra

Para abrir la cabina de análisis del difractor, se presiona el botón de seguridad de las puertas del difractor que tiene la leyenda “Open door” tal como muestra la Figura 4. Éste se encuentra ubicado en los tableros de control de difractor, en ambos lados. Inmediatamente después de presionar el botón, se escucha un sonido indicativo de que el seguro de las puertas ha sido liberado y es entonces cuando se deben abrir. En caso de no abrir las compuertas del difractor rápidamente, se activará de nuevo el seguro y deberá repetir la opresión de oprimir el botón “Open door”. Importante: Si se abren las puertas sin oprimir el botón “Open Door” se activarán las alarmas de seguridad en el difractor que bloquearán su operación. Estas alarmas solo pueden ser desactivada por el personal encargado de la Unidad de Apoyo a la DRX. Una vez abierta la cabina de análisis, el piloto rojo de alarma del panel de control se encenderá y no volverá apagarse hasta el cierre correcto de las puertas de la misma.

Una vez abierta la cámara, colocar el portamuestra sobre el porta-portamuestra circular que se encuentra dentro del difractor y asegurarlo subiendo el émbolo que está por debajo del soporte de dicho porta-portamuestra desplazándolo hacia arriba hasta el tope, Figura 5A. Detrás de dicho émbolo se encuentra una palanca que, tirando hacia ti, libera el portamuestra, Figura 5B.



Figura 4. Panel de control de la cabina de trabajo del D8T2T (enmarcados en rojo).

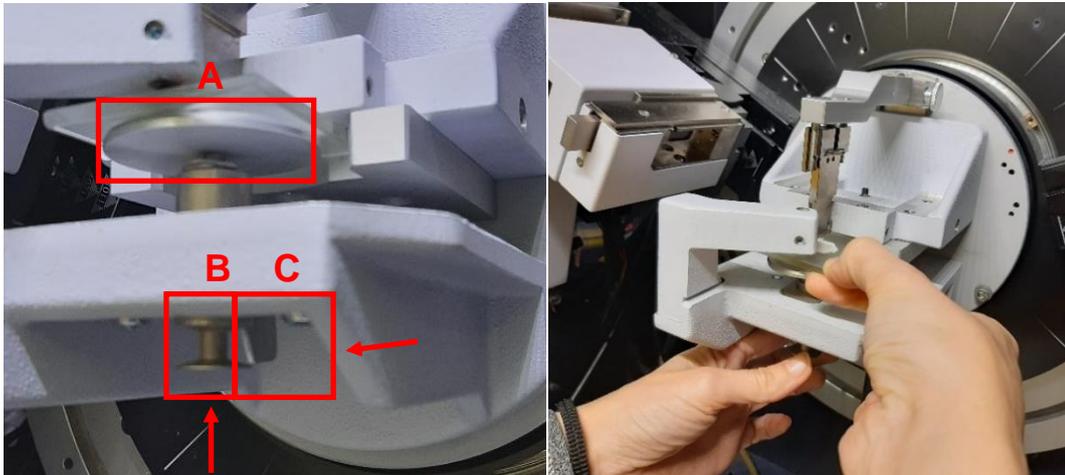


Figura 5. Detalle del portamuestra. Porta-portamuestra circular (A) que sujeta al portamuestra, émbolo de elevación (B) para ajustar el portamuestra antes de medir y pestaña para soltar el portamuestra al finalizar (C). Las flechas indican la dirección de empuje.

C. Obtención del difractograma

Los ordenadores asociados a los difractómetros tienen creados usuarios de los grupos de investigación del ICMM y cada uno de ellos tiene una contraseña propia. Dentro de su usuario como grupo puede crearse carpetas independientes para cada uno de los distintos usuarios del grupo de investigación. Se recomienda que estas carpetas cuelguen de "Documentos" ya que es la carpeta compartida en la red interna del ICMM.

C.1. Obtención del archivo de condiciones de medida *dqi*

Pinchar en el programa XRDWIZARD. En la pestaña "File" seleccionar "New" para crear un nuevo archivo.

Nos saldrá la pantalla de la Figura 6. Aquí, en "Detector Selection", desplegamos la pestaña y elegimos el detector con el que cuenta el difractómetro. Elegiremos el "PSD LynxEye". Damos a Ok.

Posteriormente volvemos al índice general y desplegamos "Range#1".

Aquí vamos a "Scan Parameters" e introducimos nuestras condiciones de medida. Figura 7:

- Start (referido al ángulo 2Theta inicial) Ver Nota.
- Stop (ángulo 2Theta final, no superar 120°).
- Step size (tamaño de paso).
- Time/step (tiempo de recogida de información por paso).

Nota: Para la rendija 0.6 mm (que es la estándar), el ángulo 2theta inicial no debe ser menor de 3° para no dañar al detector al incidir el haz directo. En caso de querer poner 2.5° debe usarse la rendija de 0.2 mm. Nunca poner menos de 2,5°.

El resto de condiciones se obtienen automáticamente, como es el tiempo total que va a llevarnos la medida con estas condiciones (en Tot. Scan time). Damos ok.

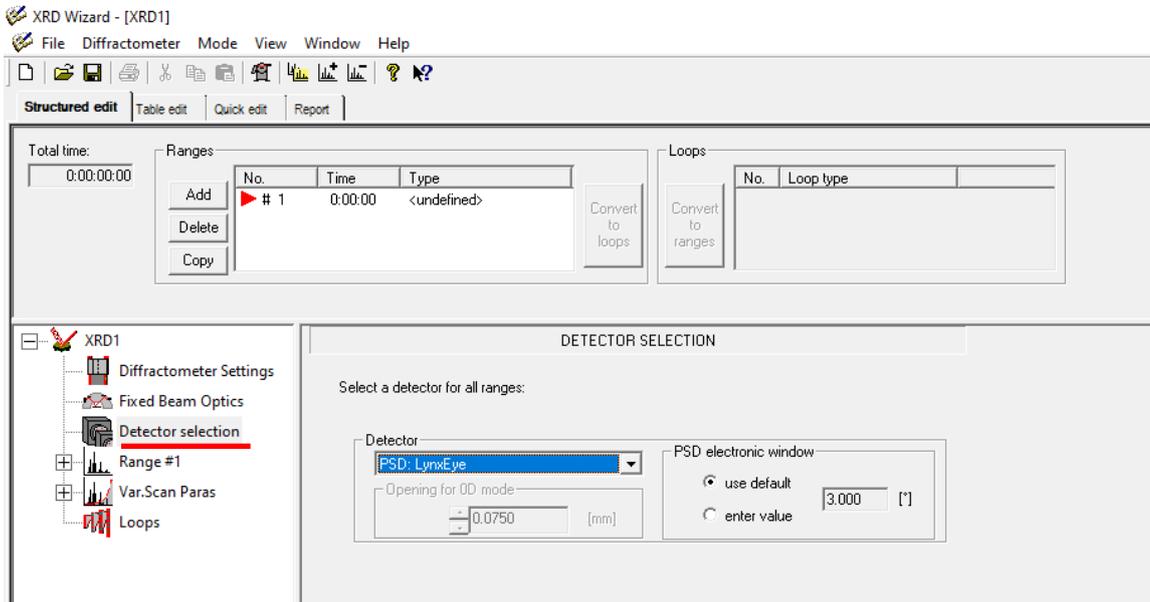


Figura 6. Pantalla del software XRDWIZARD tras dar a la pestaña de “Detector selection”, donde se escoge el detector que en ese momento tiene el difractómetro.

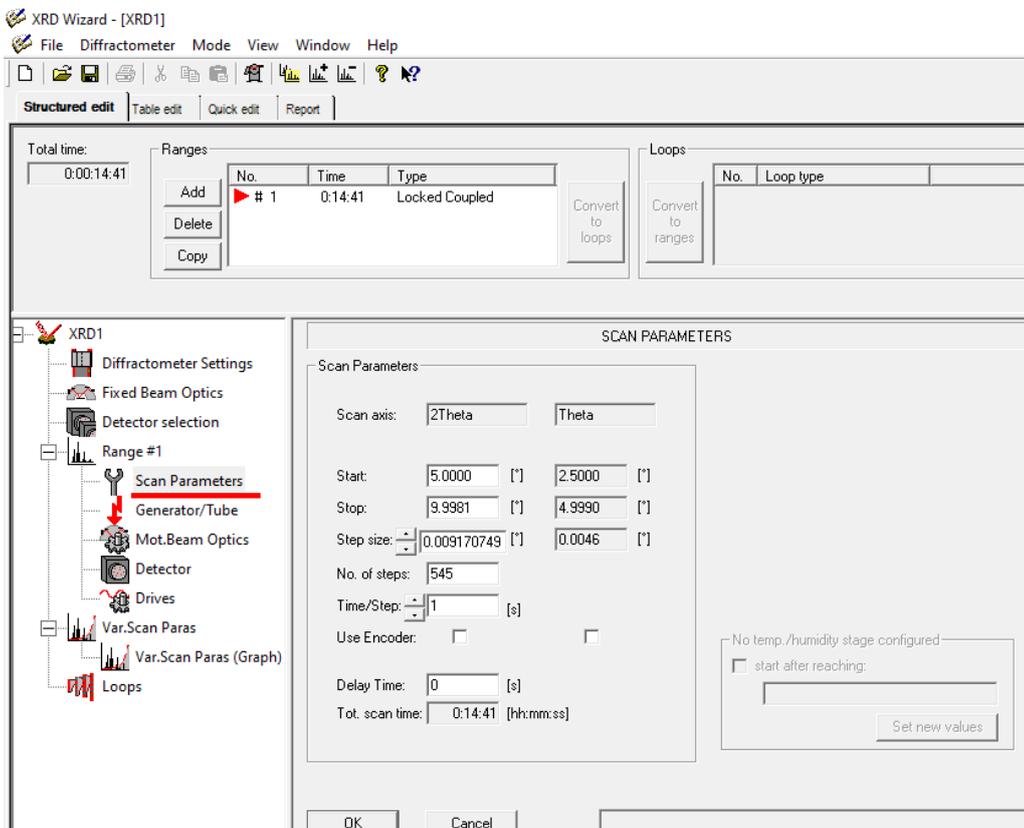


Figura 7. Pantalla del software XRDWIZARD donde seleccionar nuestras condiciones de medida.

Volvemos al índice principal a “Generator/Tube” e introducimos las condiciones de voltaje y corriente para la medida, que son **40 kV y 30 mA** (condiciones de trabajo normales para el tubo de rayos x que está montado). Damos a Ok. Figura 8.

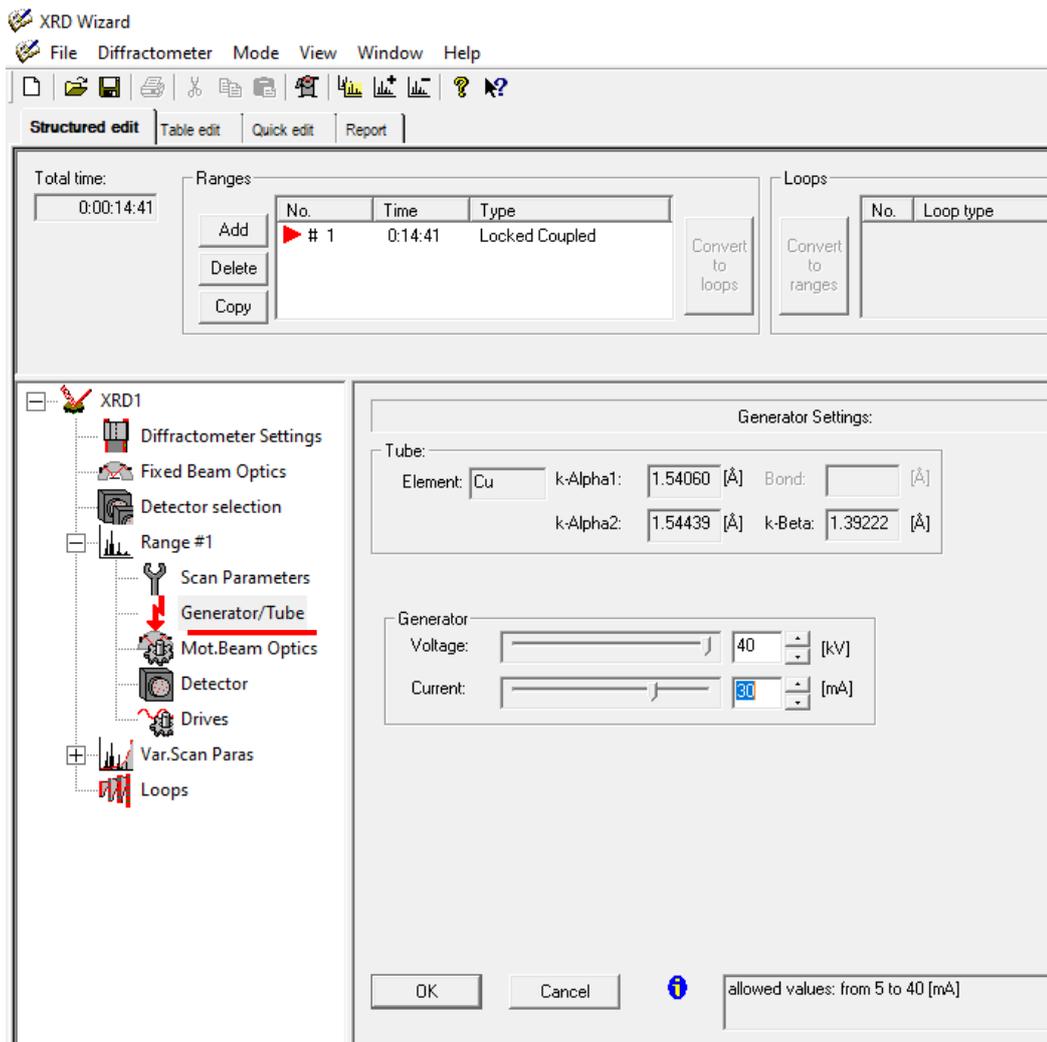


Figura 8. Pantalla del software XRDWIZARD para la selección de las condiciones de V y mA del tubo de rayos X.

Por último, para ver si las condiciones son correctas, volvemos al índice general y damos a “Loops”. Si sale el gráfico en rojo con las condiciones de medida, el archivo es correcto. Figura 9.

Por último, guardamos el fichero de medida con el nombre que queramos en nuestra carpeta (File, save as).

Cerramos el programa. Nos saldrá una pantalla donde se nos pregunta: “Do you wish to save changes in XRD1?” Indicar que no.

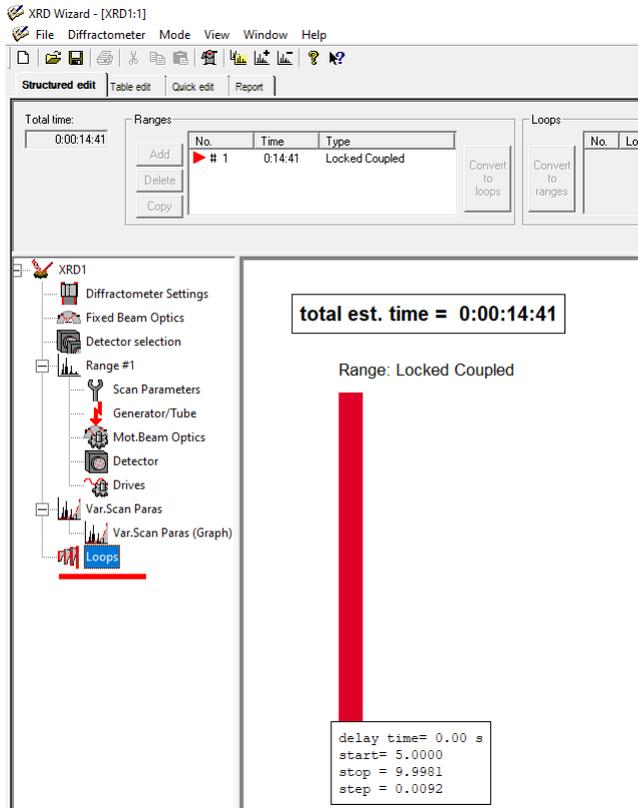


Figura 9. Pantalla del software XRDWIZARD donde se recoge los cambios que hemos realizado.

C.2. Lanzamiento de la medida

En el escritorio, seleccionamos el programa “XRD Commander”. Arriba en el menú elegimos la pestaña “JOBS”, y aquí “Create Jobs”.

Te saldrá una pantalla como esta, Figura 10:

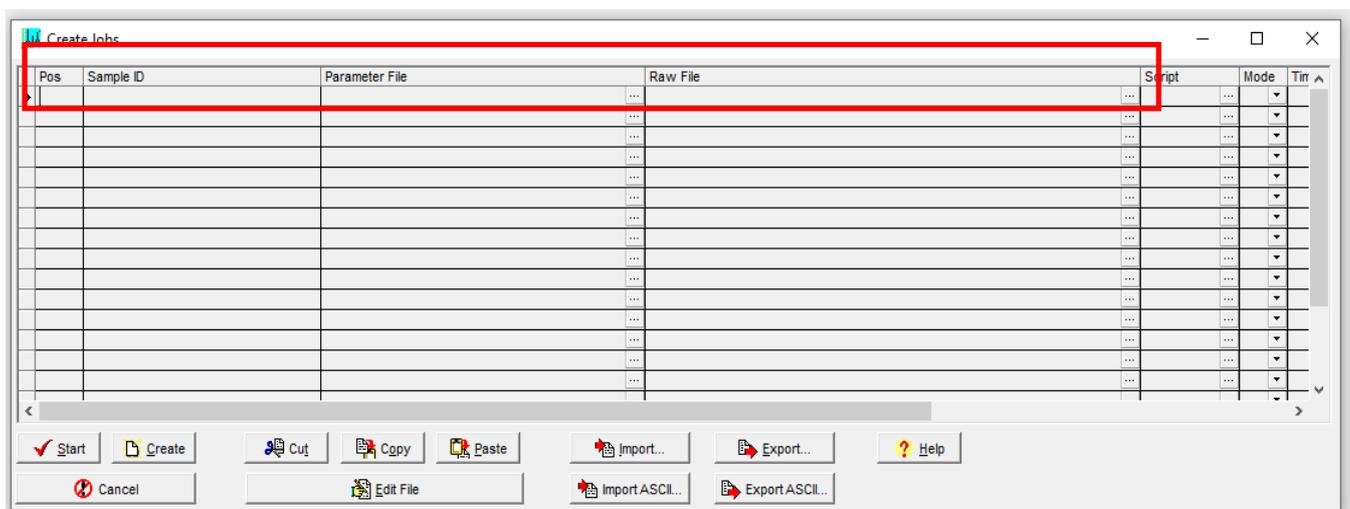


Figura 10. Pantalla del software XRD Commander donde lanzar la medida de DRX.

- En “Sample ID” podemos poner el nombre de la muestra, que saldrá en la pantalla durante la medida (pero no se guarda como nombre del fichero, por lo que es opcional).
- En “Parameter File”, pulsando el botón de los 3 puntos, buscamos el fichero dqi con las condiciones de medida que hemos creado con el programa XRDWIZARD y lo seleccionamos.
- En “Raw File” ponemos el nombre con el que queremos guardar el fichero RAW que se va a crear con el difractograma de nuestra muestra.
- Una vez cumplimentados “Parameter File” y “Raw File” damos a la pestaña “Start” en esta pantalla abajo a la izquierda. 

El difractómetro empezará a funcionar y el indicador luminoso “Busy” del panel de control (Figura 3) se iluminará en amarillo y el indicador luminoso del shutter del tubo de rayos X pasará de verde a rojo (Figura 11) y en un tiempo empezará a dibujar el difractograma en la pantalla.

Una vez finalizada la medida, abrir la cabina del difractómetro y recuperar la muestra.

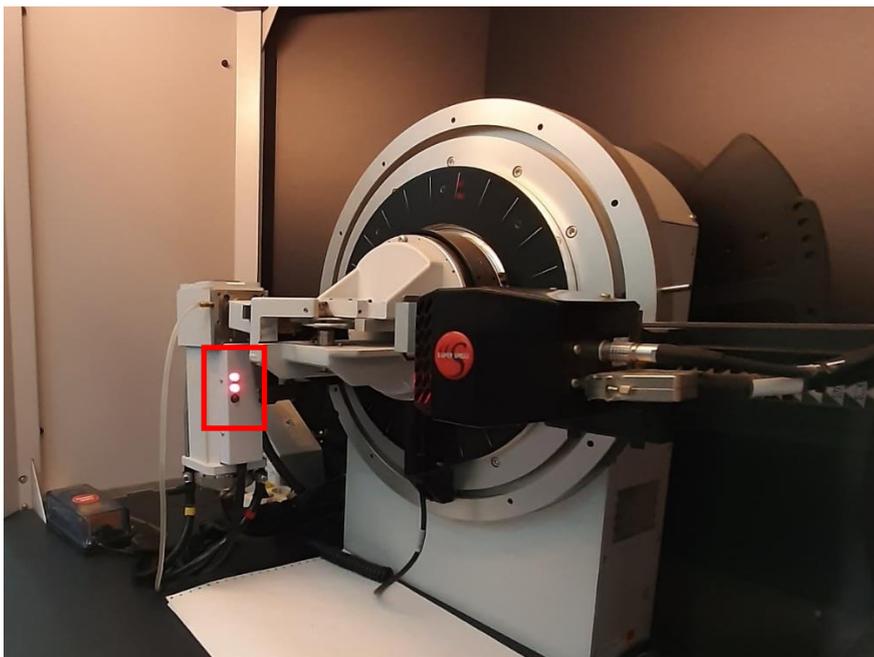


Figura 11. Indicadores luminosos del shutter encendido en rojo, shutter abierto (enmarcado en rojo).

C.3. Secuencia para parar una medida en trancurso

En el caso que sea necesario, puede pararse una medida que se esté llevando acabo. Esto se hace yéndonos a la pestaña “Jobs” y aquí elegir “STOP Halt All Jobs”. En este momento el shutter se cerrará, la medida habrá parado y se habrá guardado el archivo .raw con nuestra medida hasta ese instante.

Para trabajar de nuevo es necesario ir de nuevo a la pestaña “Jobs” y seleccionar “Delete Selected Jobs” con objeto de vaciar los buffers de información. Posteriormente, se podrá trabajar de nuevo.

C.4. *Trasformación a otras extensiones del archivo de medida “.raw”*

XCH: En la pestaña “File”, abrir con “Open” el archivo de medida “.raw” que queráis transformar. Volver a “File” y seleccionar “UXD format”. Aquí seleccionar las condiciones que queráis que tenga vuestro archivo (ej. Solo Intensity para trabajar con el software DRX-TG o Angle+Intensity para obtener un fichero con dos columnas, editable con software Origin o similar).

2.4 Operación de medida del difractómetro D8 DaVinci

A. *Comprobación de que el equipo está operativo para el uso*

Cuando queremos usar un equipo es necesario realizar una serie de comprobaciones.

- Los indicadores de alta tensión deben estar encendida (Figura 12).
- El shutter debe estar cerrado (indicadores luminosos del tubo de rayos X apagados, Figura 13).
- El panel de control izquierdo debe tener el botón superior iluminado en amarillo y el inferior en blanco (Figura 12). En caso contrario, habría que avisar a los responsables técnicos.



Figura 12. Difractómetro D8 DaVinci.

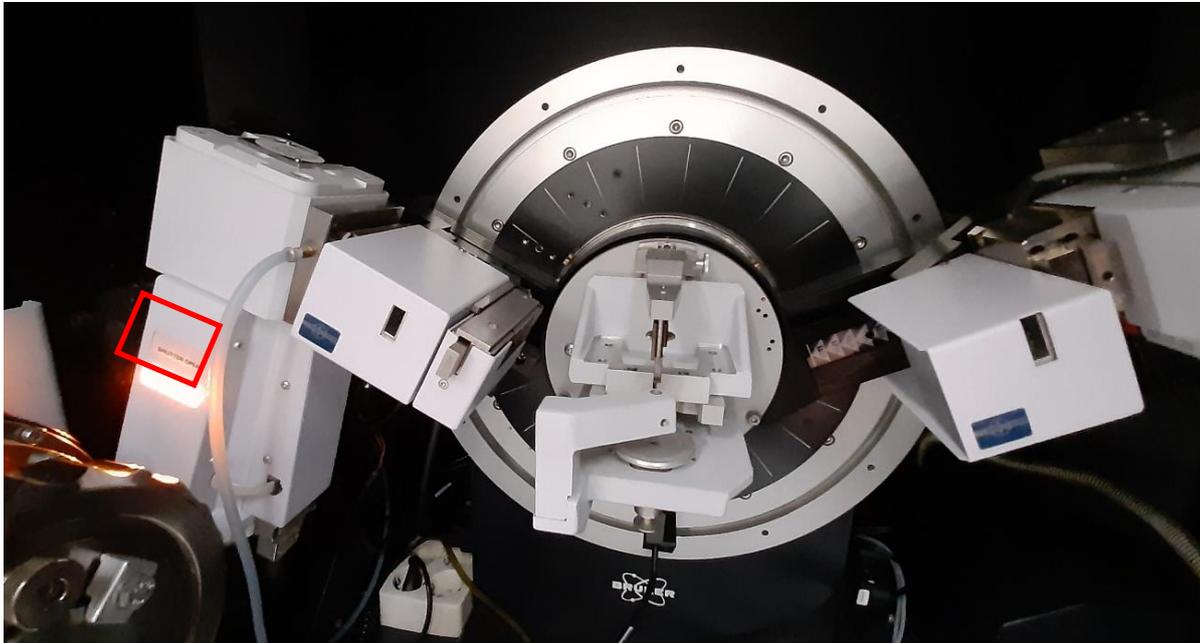


Figura 13. Vista exterior del tubo de rayos X del DaCinci. Indicador luminoso de rayos X encendido y el de shutter apagado (indicando que está cerrado). El equipo está preparado para trabajar.

Si hubiera una medida en marcha, el indicador inferior del panel izquierdo pasa a iluminarse azul y el shutter indicaría encendido (Figura 14). En este caso habría que esperar a que terminara y el usuario anterior retirara su muestra.

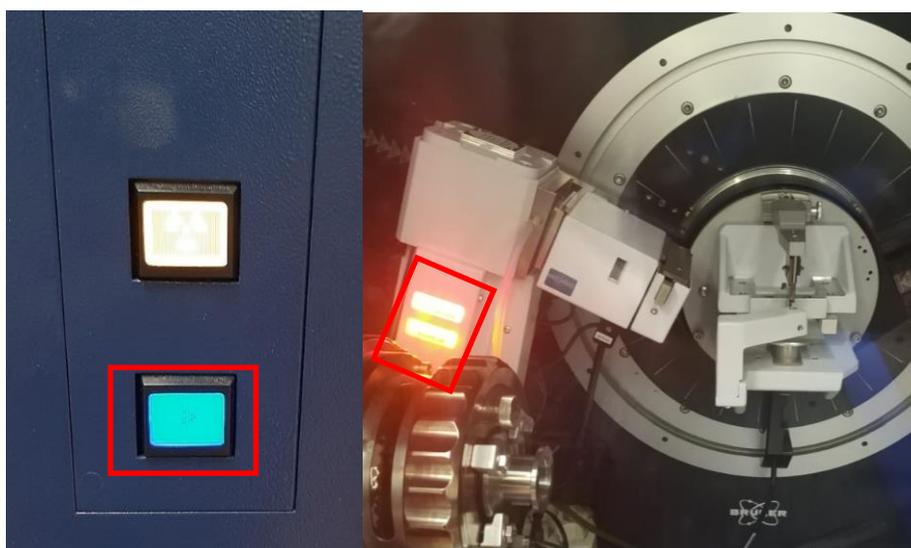


Figura 14. Foto Izquierda: Panel de control izquierdo con las luces encendidas cuando el equipo está en uso. Foto derecha. Vista exterior del tubo de rayos X del DaVinci. Indicadores luminosos de rayos X encendido y del shutter encendido y por tanto, abierto. El equipo está midiendo.

B. Montaje de la muestra

Para abrir la cabina de análisis del difractómetro, se presiona el botón de seguridad de la puerta de la cabina de trabajo del difractómetro (Figura 15). El soporte del portamuestra es diferente que en el otro difractómetro. Hay que empujar con una mano un soporte que tiene debajo un muelle e introducir el portamuestra deslizándolo por el lado. En este caso es mucho más fácil dar a la cuchilla (pieza situada justo encima de vuestra muestra durante la medida) y hay que tener mucho cuidado. Particularmente importante es nunca inicializar los drives del goniómetro con la cuchilla puesta, en caso de reinicio accidental del equipo.

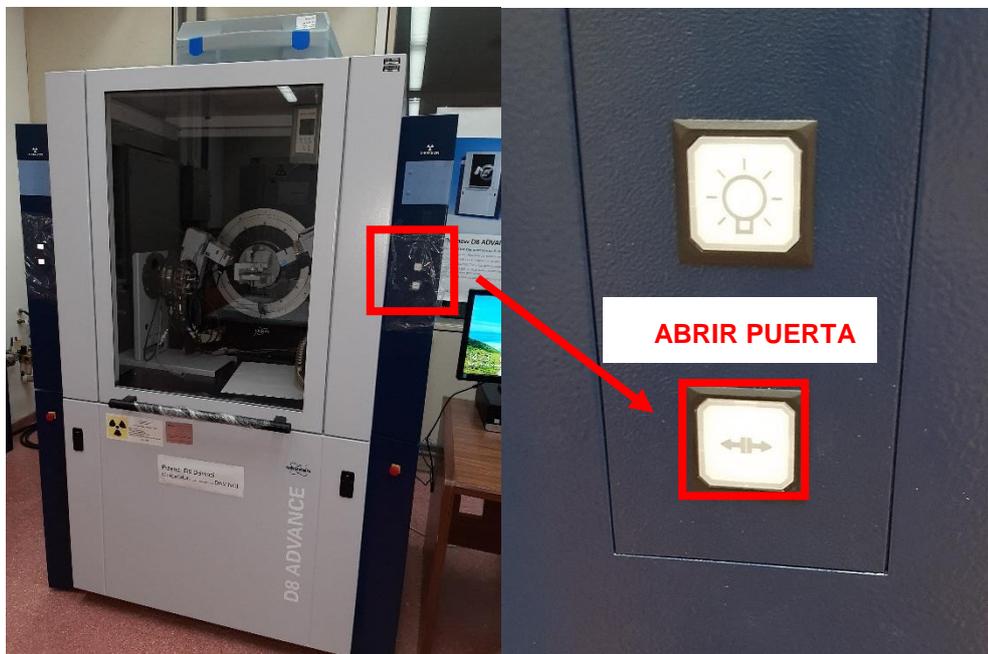


Figura 15. Difractómetro DaVinci (izquierda) y detalle del panel de botones (derecha).

C. Obtención del difractograma

Al igual que en los ordenadores de control de los difractómetros anteriores, el ordenador del difractómetro DaVinci tiene creados usuarios de los grupos de investigación del ICMM. En todos tienen la misma contraseña que su grupo debe comunicarle. Dentro de su usuario puede crearse carpetas independientes para cada uno de los distintos usuarios del grupo de investigación. Se recomienda que estas carpetas cuelguen de “Documentos”, ya que es la carpeta compartida en la red interna del ICMM.

C.1. Obtención del archivo de condiciones bsmf

En el escritorio de todos los usuarios está la aplicación DIFFRAC.MEASUREMENT. Pinchamos el icono. Al abrirse nos pedirá un password y sin poner nada, damos a OK.



De esta manera el programa se abrirá y se conectará con el equipo. Esperar sin tocar nada hasta que aparezca esta pantalla, Figura 16.

En esta aplicación, de forma conjunta, tenemos el comando WIZARD (para crear los archivos de condiciones de medida, en este caso con extensión bsml), el comando START JOBS (para lanzar la medida), y el COMMANDER, para ver el resultado de la medida.

Para crear el fichero .bsml vamos a utilizar un archivo ya creado, con toda la información de las rejillas y condiciones para el tubo y solo vamos a cambiar las condiciones de medida. Para ello vamos a la pestaña de arriba “Wizard” y allí elegimos la acción “open” donde abriremos en la carpeta *Documentos*, la carpeta *Method_Servicio XRD*. Allí están disponibles dos archivos según necesitéis usar filtro de Ni (para eliminar la radiación K_{β} de muestras muy cristalinas) o no.

- standard method_FL_4_45_003_7min_with slit Ni.bsml
- standard method_FL_4_45_003_7min_without slit Ni.bsml

Imaginemos que no necesitamos filtro de Ni (que es el caso más habitual) y hemos abierto el segundo fichero “without slit Ni”. Obtendremos esta pantalla, Figura 17, con todos los detalles de la configuración del difractor. Aquí nos vamos al menú de la izquierda y pinchamos en “XRD setup” y nos aparece la pantalla de la Figura 18.

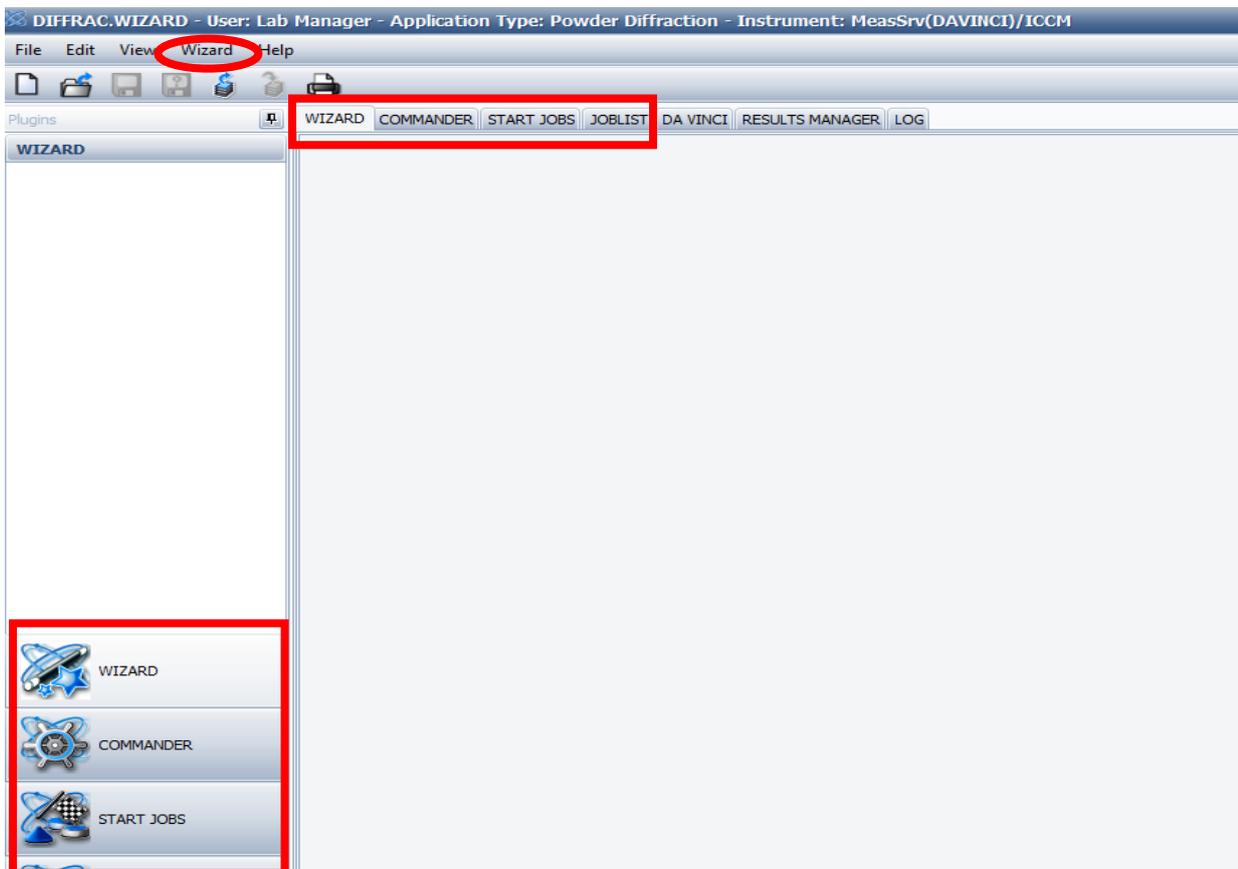


Figura 16. Pantalla de inicio de la aplicación DIFFRAC.MEASUREMENT.

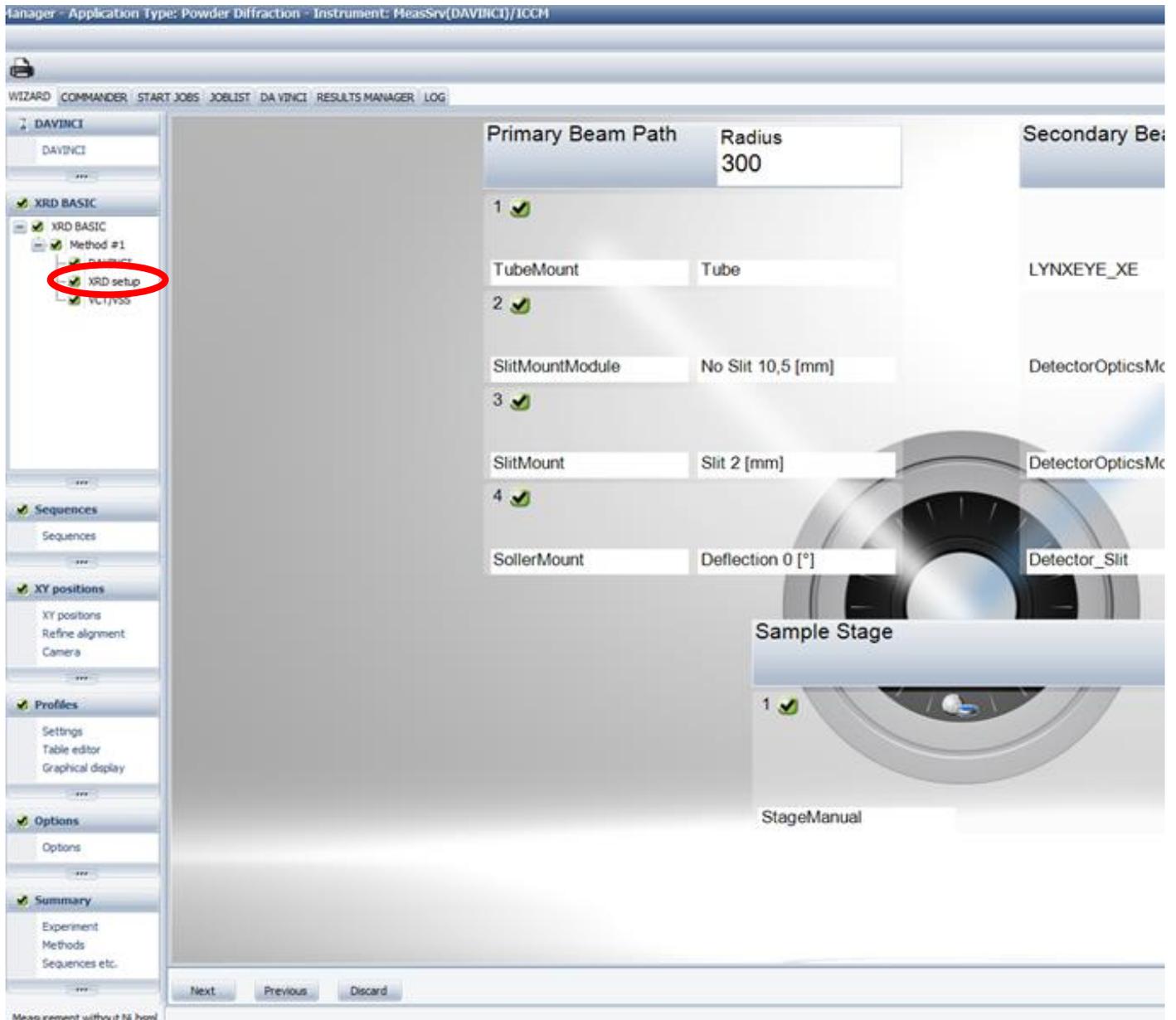


Figura 17. Pantalla tras seleccionar la pestaña Wizard en el software DIFFRAC.MEASUREMENT con la configuración del difractor. Detalle seleccionado (XRD setup), lugar donde se indican las condiciones de medida.



Manager - Application type: Powder Diffraction - Instrument: Prossyr(DAVINCI)/ICCM

WIZARD COMMANDER START JOBS JOBLIST DAVINCI RESULTS MANAGER LOG

DAVINCI

DAVINCI

2 XRD BASIC

Method #1 DAVINCI

XRD setup VCT/ISS

Scan type Coupled TwoTheta/Theta

Scan mode Continuous PSD flat

Time / Step [s] 0,500

Delay time [s] 0,0

Steps 221

Total time [s] 270,5

Scan parameters

Scan axis	Unit	Abs. start	Abs. stop	Increment
2Theta	[°]	34,0002	36,2279	0,010121900557
Theta	[°]	17,0001	18,1135	0,005060750279
PSD opening	[°]	3,208801292		

Fixed drives

Figura 18. Pantalla del software DIFFRAC.MEASUREMENT donde se indican las condiciones de análisis.



En la pantalla de la figura 18 cambiamos las condiciones existentes por las que queremos.

- En la primera línea 2Theta, en “Abs start” introducimos el ángulo 2Theta inicial (nunca menor de 3° para no dañar al detector al llegarle el haz directo).
- En Abs Stop ponemos el ángulo 2Theta final (siendo 120° el máximo que permite el equipo).
- En increment, ponemos el tamaño de paso de las condiciones que queremos usar.
- Para introducir el tiempo de medida por paso, nos vamos a arriba a Time/step (s).

El resto de condiciones se obtienen automáticamente (es interesante conocer el tiempo total que nos va a llevar nuestra medida en “Total time (s)”).

Una vez cambiadas nuestras condiciones, vamos a la pestaña Wizard y aquí seleccionamos “Save as” para guardar nuestro fichero de condiciones de medida bsml con el nombre que queremos.

C.2. Lanzamiento de la medida

Al volver a la misma pantalla, vamos a la pestaña “START JOBS” y al pulsar nos sale la siguiente pantalla, Figura 19.



Figura 19. Pantalla del software DIFFRAC.MEASUREMENT al seleccionar la pestaña Start Job para el lanzamiento de la medida.

En “Sample ID” podemos poner el nombre de la muestra, que saldrá en la pantalla durante la medida (pero no se guarda como nombre del fichero, por lo que es opcional).

En “Experiment Name”, ponemos justo el cursor en la línea de abajo y al pulsar saldrá una pestaña con tres puntos. Si damos en esta pestaña, podremos buscar el archivo bsml que hemos creado con las condiciones y lo seleccionamos. Si el archivo fuese correcto con las condiciones del difractómetro para trabajar, en la pestaña “Valid” debería salir un símbolo de correcto en verde. En “Result File Name”, abajo encontramos la misma pestaña con 3 puntos. Cliqueando en ella, elegimos la carpeta y nombre con el vamos a guardar la medida.

Una vez cumplimentados estos datos, será activada la pestaña “Start Jobs” (abajo, a la derecha de la pantalla) donde, al clicar en ella, empezará la medida.

Si quieres ver la pantalla donde se va dibujando el difractograma, pulsar en la pestaña superior “COMMANDER”.



C.3. Transformación a otras extensiones del archivo de medida .raw

Para ello usamos la aplicación “DIFFRAC FileExchange”

Este programa nos permite la conversión del formato raw generado por el difractor DaVinci a otros formatos raw que nos permitan ser leídos por otros programas de análisis.

Al arrancar el programa aparece una plantilla dividida en dos partes:

> La ventana de la izquierda (**Source**):

- Comprobar que estamos en C:
- Seleccionar Users
- Seleccionar GRUPO
- Seleccionar Documents
- Comprobar (en nuestras carpetas) que se ha generado el archivo raw de la medida que queremos convertir.

> La ventana de la derecha (**Target**):

- Comprobar que estamos en C:
- Seleccionar el formato raw en que vamos a convertir (raw V3).
- Seleccionar Users
- Seleccionar GRUPO
- Seleccionar Documents
- Seleccionar carpeta en la que vamos a guardar el archivo convertido (raw V3).

Volver a Source y marcar el archivo a convertir. En la parte inferior de la plantilla se activará el botón F-9 Convert y, pulsándolo hará la conversión, que se reflejará en Target. Finalizando el proceso. Sólo se puede convertir archivos de uno en uno.

2.5. Como trasladar el archivo de medida a mi ordenador

Los ordenadores asociados a los difractómetros tienen internet, por lo que podemos enviarnos los resultados mediante email.

Además, todos los ordenadores de los difractómetros de polvo tienen las carpetas de los usuarios compartidas (por supuesto, con su contraseña) y se pueden acceder a ellas en la red interna del ICMM.



2.6. Tratamiento de Datos. Software EVA

Existen multitud de programas para realizar un análisis de los datos obtenidos en difracción de rayos X. La Unidad cuenta con el Software EVA de Bruker, disponible en los ordenadores de los difractómetros.

También es posible trabajar en vuestro ordenador personal del ICMM con EVA ya que el Servidor de Rayos X cuenta con hasta 10 licencias. Para su instalación y acceso debéis solicitarlo a rayos.x@icmm.csic.es

Desde EVA es posible cargar el archivo de interés con la extensión “.raw” y realizar distintas operaciones (acercamiento a una zona de interés, disminución de ruido, localización de picos y distancias interplanares, ajuste de fondo...).

Además, la Unidad cuenta con la base de datos “Power Diffraction File PDF-4+ 2021” con la que podemos tener fichas actualizadas seleccionando algunos criterios de búsqueda como, por ejemplo, posibles elementos o compuestos químicos presentes en el compuesto cristalino en cuestión. Una vez identificado el patrón de difracción de interés, se puede extraer la información mediante un archivo PDF. Esta base de datos está asociada con el software EVA, de los ordenadores de los difractómetros DaVinci y D8 TT

También está disponible en el Servidor que dispone el laboratorio de rayos X (RX-SERVER1), junto con otros programas de análisis de datos más potentes de los que se dispone licencia, como son:

- TOPAS (Bruker): Programa para resolución y refinamiento estructural con datos de difracción de polvo
- Material Studio: Suite de programa de simulación multipropósito. Incluye un módulo para análisis de datos de difracción de polvo.
- CCDC ConQuest 2.0.5: Base de datos CCDC de estructuras cristalinas.

Para el acceso a estos ordenadores, los grupos de investigación deben solicitarlo a rayos.x@icmm.csic.es

2.7. Como actuar en caso de incidencia o EMERGENCIA en uno de los difractómetros

Ante cualquier incidencia o duda, debéis poneros en contacto con la responsable técnica del Servicio de Rayos X:

Dra. Fátima Esteban, despacho 204, teléfono de contacto 437023.

En caso de no localizarla, y ser urgente, acudir a los responsables científicos:

Dr. Felipe Gándara Barragán (teléfono de contacto 437 014)

Prof. Enrique Gutiérrez Puebla (teléfono de contacto 437 054)

En caso de EMERGENCIA (ejemplo: se detecta fuego en el equipo, fallo mecánico con choque de los brazos del goniómetro...) los difractómetros cuentan con una seta de emergencia para forzar una parada inmediata del equipo (tanto de la alta tensión como la electrónica). Posteriormente comunicarlo a los responsables técnicos y científicos del Servicio de Difracción de Rayos X.