
Nome: TOP021 - Cristalografia, Difração de raios X e Refinamento Rietveld

Nível: M/D Obrigatória: Não Carga Horária: 30h Número de Créditos: 02

Professor(es) : Waldemar A. de A. Macedo e Marlon Luiz Hneda (Pós-doutorando CDTN)

Ementa

1. Cristalografia: resumo histórico e importância;
2. Simetrias; simetria cristalina;
3. Sistemas cristalinos; redes de Bravais;
4. Rede recíproca; classes de simetria;
5. Grupo pontual e grupos espaciais;
6. Planos cristalográficos; índices de Miller; estrutura cristalina;
7. Difração de raios X: produção de raios X; difração por um átomo e pela cela unitária; Lei de Bragg;
8. Fatores que influenciam a intensidade do feixe difratado (estrutura, polarização, temperatura, multiplicidade, etc.);
9. Refinamento Rietveld: Apresentação do programa Fullprof (distribuição livre)
10. Apresentação de alguns exemplos de refinamentos de estruturas;
11. Aulas práticas usando o programa Fullprof;

Bibliografia

- 1 - Cullity, B.D.; "Elements of X-Ray Diffraction". 2ª ed. Massachusetts: Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1978. 555 p.
- 2 - F. S. Borges. Elementos de Cristalografia. Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa.
- 3 - W. D. Callister. Materials Science and Engineering (cap. II e III), John Wiley & Sons (1997).
- 4 - Rietveld, H.M.; "A Profile Refinement Method for Nuclear and Magnetic Structures" J. Appl. Cryst., v. 2, p. 65-71, 1969.
- 5 - Rietveld, H.M.; "Line profiles of neutron powder-diffraction peaks for structure refinement", Acta Cryst., v. 22, p. 65, 1967.
- 6 - Rodríguez-Carvajal, J.; "Recent advances in magnetic structure determination by neutron powder diffraction" , Phys. B, v. 192, p. 55-69, 1993.