

## Relatório de Dados da Disciplina

---

Sigla: GMG5879 - 1 Tipo: POS

Nome: Difractometria de Raios X

Área: Mineralogia Experimental e Aplicada (44144)

Datas de aprovação:

CCP: 25/06/2013 CPG: 25/06/2013 CoPGr:

Data de ativação: 25/06/2013 Data de desativação:

Carga horária:

Total: 90 h Teórica: 5 h Prática: 2 h Estudos: 2 h

Créditos: 6 Duração: 10 semanas

Responsáveis: 751777 - Fabio Ramos Dias de Andrade - 25/06/2013 até data atual  
858702 - Luciano de Andrade Gobbo - 25/06/2013 até data atual

Conteúdo:

Difração e difratometria de raio X - Introdução: Conceitos de cristalografia e simetria;

Cela unitária e índices de Miller;

Sistemas cristalinos, retículos de bravais;

Imagens de Laue e difratogramas;

Método do pó versus monocristal.

Estrutura versus retículo cristalino: Estrutura cristalina;

Retículo cristalino direto;

Retículo recíproco e esfera de Ewald;

Imagens de Laue.

Difratômetros de raios X: Geometria - reflexão e transmissão;

Fendas divergentes e configurações;

Detectores.

Preparação de Amostras: Granulometria;

Coeficiente de absorção;

Orientação preferencial.

DRX: análise qualitativa - Equações de Laue e de Bragg;

Interpretação de difratogramas;

Banco de Dados;

Search-match: as bases do método Hanawalt;

Configurações instrumentais para análise qualitativa;

Prática de "search-match" em difratogramas;

Análise de agrupamento;

DRX: análise quantitativa I - Métodos quantitativos;

Métodos de Rietveld;

Equação geral da intensidade;

Configuração instrumental na análise quantitativa;

Influência de características da amostra;

Prática de Rietveld.

DRX: análise quantitativa II- Método de Rietveld;

Prática de Rietveld

DRX: análise quantitativa III - Quantificação de fase amorfa;

Tamanho de cristalino e deformação;

Visita a laboratórios;

Outras aplicações (em um difratômetro de raios X)

Aplicações não ambientais;

Tensão Residual;

Textura;

Reflectometria;

SAXS, PDF

**Bibliografia :**

- BISH, Post (1993) quantitative mineralogical analysis using the Rietveld full pattern fitting method. *American Mineralogist*, 78:932-940
- BURCHARD- Ott, W., 1995. *Crystallography*. Springer, 307 p.
- CLEARFIELD, Reibenspies, Bhunavesh, 2008. *Principles and applications of powder diffraction*. Wiley, 386 p.
- JENKINS, Snyder, 1996. *Introduction to X-ray powder diffractometry*, Wiley, 402 p.
- KLEIN, C., Hurlbut, C.S. 1993. *Manual of mineralogy*. 21st ed. J. Wiley & Sons Inc. 681 p.
- McCUSKER et al. (1999) Rietveld refinement guidelines. *J. Appl. Cryst.*, 32:36-50
- MITTELMEIJER, E.J. 2010. *Fundamentals of Materials Sciences*. Springer, 594 p.
- PECHARSKY, Zavalij, 2005. *Fundamentals of powder diffraction and structural characterization of materials*, Springer, 713 p.
- PUTNIS, G., 1992. *Introduction to Mineral Sciences*. Cambridge, 457 p.
- TILLEY, R., 2006. *Crystals and crystal structures*. Wiley, 255 p.
- WENK, H-R., Bulakh, A., 2009. *Minerals: their constitution and origin*. Cambridge, 646 p.
- WILL, 2006. *Powder diffraction: the Rietveld Method and the Two-stage Method*. Springer, 234 p.