

BDEC – Base de Dados de Estruturas Cristalinas (CAPES)



The image shows a web browser window with the following details:

- Browser Tabs:** Escola de Engenharia de L..., Login | BASES DE ESTRUTURA..., USP - Universidade de São Pau...
- Address Bar:** bdec.dotlib.com.br/cliente/login
- Page Header:** Bases de Estruturas Cristalinas logo (two green hexagons) and the text "BASES DE ESTRUTURAS CRISTALINAS".
- Text:** "Para acessar as bases de estruturas cristalinas, é preciso uma conta de acesso. Se você já possui uma conta, entre no sistema preenchendo os campos abaixo:"
- Form Fields:** Two input fields labeled "E-mail" and "Senha".
- Security:** A section titled "Verificação de Segurança" containing a checkbox labeled "Não sou um robô" and a reCAPTCHA logo with links for "Privacidade" and "Termos".
- Links:** "Não consegue acessar sua conta?" and "Suporte Técnico" (both in blue).
- Buttons:** A green "LOGIN" button.
- Footer:** "Não tem uma conta? [Crie uma agora!](#)"

Escola de Engenharia de L... x Início | BASES DE ESTRUTURAS... x USP - Universidade de São Pau... x +

bdec.dotlib.com.br/inicio


Pesquisar

CRYSTMET

CRYSTMET

O CRYSTMET contém dados de química, cristalografia e dados bibliográficos junto com comentários associados a respeito de detalhes experimentais de cada estudo.

[ACESSAR](#)



ICSD - Inorganic Crystal Structure Database

Contém informações sobre compostos inorgânicos de estrutura cristalina: nomenclatura; fórmula molecular; propriedades cristalográficas; condições de determinação das propriedades cristalográficas e referências bibliográficas de onde foram extraídas as informações.

[ACESSAR](#)

Mineralogy Database

Mineralogy Database

Base de dados com milhares de minerais, suas respectivas descrições, links e ampla galeria de imagem. Cada mineral possui uma página e link para tabelas com dados cristalográficos, difração de raios X (método do pó), composição química, propriedades física e óticas...

[ACESSAR](#)

NUCLEIC ACID DATABASE

Nucleic Acid Database

Repositório de estruturas tridimensionais informativas sobre ácido nucleico. A NDB segue o formato de dicionário utilizado pelo Worldwide Protein Data Bank.

[ACESSAR](#)



CRYSTMET--The Metals Database (Version 5.9.0)



File Edit View Help

Periodic Table | Bibliographic | Unit Cell | Powder Patterns | Formula | ID Codes

Search

Results

Help



| | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-------------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 1 | | | | | | | | | | | | | | | | | 18 |
| H | 2 | | | | | | | | | | | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | He |
| Li | Be | | | | | | | | | | | B | C | N | O | F | Ne |
| Na | Mg | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | Al | Si | P | S | Cl | Ar |
| K | Ca | Sc | Ti | V | Cr | Mn | Fe | Co | Ni | Cu | Zn | Ga | Ge | As | Se | Br | Kr |
| Rb | Sr | Y | Zr | Nb | Mo | Tc | Ru | Rh | Pd | Ag | Cd | In | Sn | Sb | Te | I | Xe |
| Cs | Ba | La | Hf | Ta | W | Re | Os | Ir | Pt | Au | Hg | Tl | Pb | Bi | Po | At | Rn |
| Fr | Ra | Ac | | | | | | | | | | | | | | | |
| Lanthanides | | Ce | Pr | Nd | Pm | Sm | Eu | Gd | Tb | Dy | Ho | Er | Tm | Yb | Lu | | |
| Actinides | | Th | Pa | U | Np | Pu | Am | Cm | Bk | Cf | Es | Fm | Md | No | Lr | | |

Query

Require Coordinates Only selected elements

And Or

Search

Clear

Help

For Help, press F1

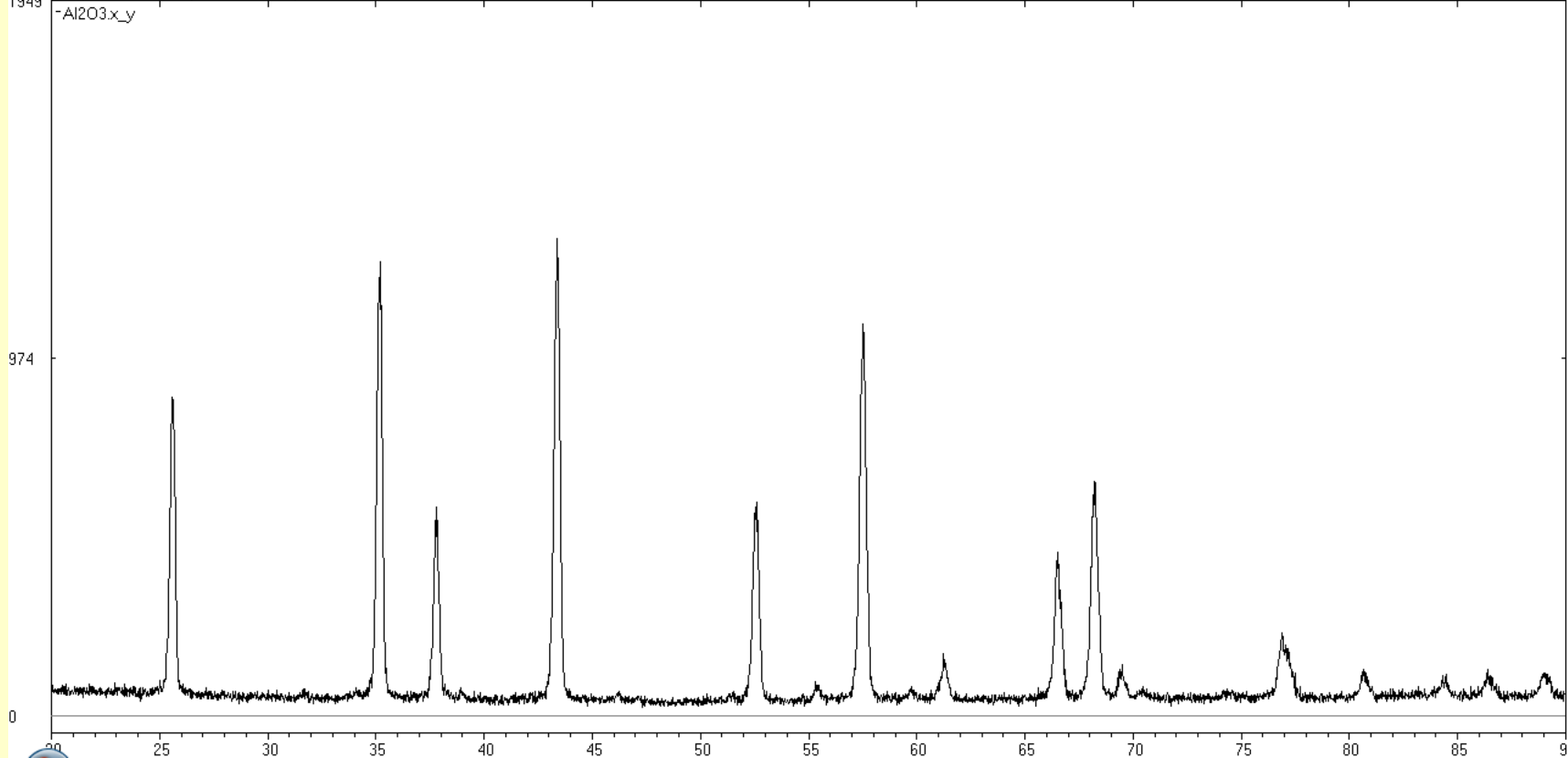


PowderCell 2.4 - [powder pattern]

File Structure Select Options Diffraction Refinement Windows Special Help



Rp= 0.00 Rwp= 0.00 Rexp= 0.00 2 theta =34.30 d = 2.612 Int = 1559.46



A vertical navigation and control panel on the right side of the plot area. It contains several directional arrows (up, down, left, right) for navigating through the data. Below these are icons for zooming in and out, and a dropdown menu currently set to "none".



File Edit View Help

Periodic Table | Bibliographic | Unit Cell | Powder Patterns | Formula | ID Codes

Search

Results

Search the data base for matching powder patterns

You can either search only those entries which have enough information to compute a powder pattern or search all entries. If a powder pattern could not be computed, then the cell dimensions were used to insert all the possible line positions.

Use data for all entries

Input Sample Data

Add

Delete

2.083000
2.549000
1.600000
3.475000

Input Data As

d spacing

2-theta

Radiation

Cu

Wavelength

1.5418

Tolerance for line matches

0.003

Input known elements in the sample

Help

Set 0

ID 130134

Al2O3

< 1/6 >

Search

Clear

Help



File Edit View Help

Search

Results

Help

Set 0

ID 130134

Al2 O3

< 1/6 >

Results | Details | Coordinates | Geometry | View Structure | Powder Pattern | Missym

| Query | No. Hits | Command |
|-------|----------|---|
| Q0 | 6 | powder 2.083000 2.549000 1.600000 3.475000 tol 0.003000 |

< ||| >

Combine Sets

Delete Set

Details of Set Q0

| ID Code | Formula | Type | R-Fac | Authors |
|---------|---------|-------|-------|--|
| 130134 | Al2 O3 | Al2O3 | 0.027 | N.Ishizawa, T.Miyata, I.Minato, F.Marumo, S.Iwai |
| 63984 | Al2 O3 | Al2O3 | 0.026 | E.N.Maslen, V.A.Streltsov, N.R.Streltsova, N.Ishizawa, Y.S |
| 63985 | Al2 O3 | Al2O3 | 0.030 | E.N.Maslen, V.A.Streltsov, N.R.Streltsova, N.Ishizawa, Y.S |
| 63986 | Al2 O3 | Al2O3 | 0.026 | E.N.Maslen, V.A.Streltsov, N.R.Streltsova, N.Ishizawa, Y.S |
| 63987 | Al2 O3 | Al2O3 | 0.031 | E.N.Maslen, V.A.Streltsov, N.R.Streltsova, N.Ishizawa, Y.S |
| 63988 | Al2 O3 | Al2O3 | 0.026 | E.N.Maslen, V.A.Streltsov, N.R.Streltsova, N.Ishizawa, Y.S |

< ||| >

For Help, press F1



File Edit View Help

Search

Results

Help

Set 0

ID 63987

Al2O3

< 5/6 >

Results **Details** Coordinates Geometry View Structure Powder Pattern Missym**ID: 63987**Formula: Al₂O₃Structure Type: Al₂O₃Space Group: **R-3c (167)**

Pearson Symbol: hR10

Cell Dimensions

a = 4.7540(5)

b = 4.7540(5)

c = 12.9820(6)

 $\alpha = 90$ $\beta = 90$ $\gamma = 120.$

Volume = 254.09

Z = 2

Temperature = 293K

Reference

E.N.Maslen, V.A.Streltsov, N.R.Streltsova, N.Ishizawa, Y.Satow

Acta Crystallographica B (39,1983-) [ASBSDK]

Volume **49B** 973 - 980 (1993)



File Edit View Help

Search

Results

Help

Set 0

ID 63987

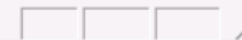
Al2 O3

< 5/6 >

Results | Details | **Coordinates** | Geometry | View Structure | Powder Pattern | Missym

| Atom | Wyckoff | Site Sym | X | Y | Z | Uiso | Occ. |
|------|---------|----------|---------|---|---------|------|------|
| Al | 12c | 3. | 0 | 0 | 0.35227 | | 1 |
| O | 18e | .2 | 0.69396 | 0 | 1/4 | | 1 |

Cursor is at 58.62





CRYSTMET--The Metals Database (Version 5.9.0)



File Edit View Help

Results | Details | Coordinates | Geometry | View Structure | Powder Pattern | Missym

Search

Results

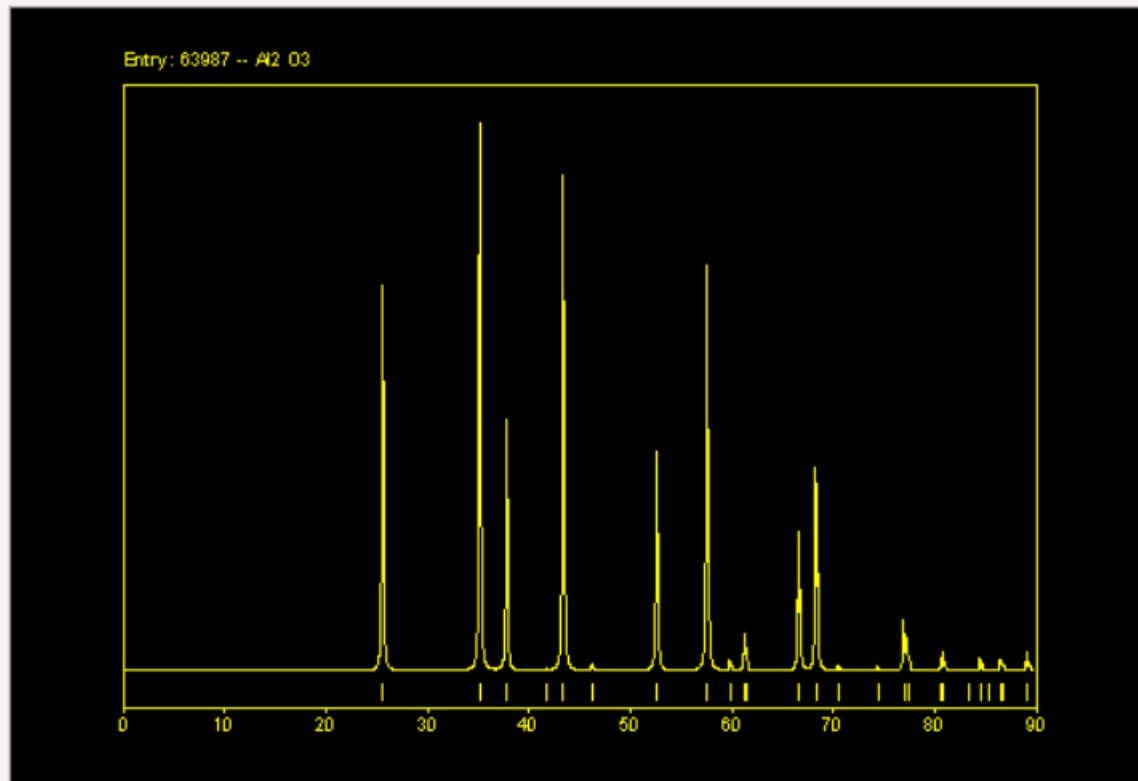
Help

Set 0

ID 63987

Al2 O3

< 5/6 >



Refresh

List Peaks

Save Pattern

2-theta Max

90

Radiation

Cu

WaveLength

1.5418

Biso

4

K-alpha2

Cursor is at 43.22 [1,1,3 -- 94.34]