

CRISTALOGRAFIA E DIFRAÇÃO DE RAIOS X (2012)

2ª atividade prática: Identificação de um composto pelo Método Hanawalt.

O arquivo de dados a ser analisado deverá ser correspondente ao último dígito do número USP. Por exemplo: se o número de matrícula for 1234567, o difratograma a ser analisado será o número 7.

- a) Monte um gráfico de intensidade em função de 2θ .
- b) Determine a posição angular de cada pico;
- c) Calcule a distância interplanar para cada pico;
- d) Calcule a intensidade relativa para cada pico (considere o pico mais intenso como 100%);
- e) Faça uma tabela com os picos em ordem decrescente de intensidade.
- f) A partir do conjunto de distâncias interplanares e intensidades dos picos e considerando-se que a amostra seja monofásica (ou quase), identifique o composto pelo Método Hanawalt.
- g) Consulte a ficha JCPDS correspondente e anote os seguintes dados do composto: tipo de rede, parâmetro(s) de rede, grupo espacial e n° de fórmulas por célula unitária (Z).
- h) Faça uma tabela comparando as distâncias interplanares e as intensidades relativas calculadas e tabeladas para cada reflexão.