CRISTALOGRAFIA E DIFRAÇÃO DE RAIOS X (2012)

3ª atividade prática: simulação de difratogramas

utilizando o programa PowderCell

1) Analisando um exemplo:

Clique em <File> + <Load> e escolha um arquivo de exemplo (*.cel). Na tela, poderão ser visualizados: a) esquema da estrutura cristalina e b) uma simulação do difratograma. Para visualizar os dados de entrada, clique em <File> + <edit initial data>.

No esquema da estrutura:

- use as teclas de movimentação localizadas à direita da tela para girar a estrutura;

Na simulação do difratograma:

- Clique em <Diffraction> + <Experiment> para mudar o intervalo angular mostrado;

- clique em <Diffraction> + <HKL list> para visualizar uma listagem das reflexões;

- clique em <Diffraction> + <Load powder pattern> para inserir um difratograma experimental e compará-lo com o simulado. O arquivo experimental deve estar com a extensão (*.x_y) e apresentar duas colunas (2teta x intensidade).

2) Inserindo uma estrutura nova:

Clique em <File> + <new>. Aparecerá uma caixa, onde devem ser inseridos os seguintes dados: space-group; parâmetros de rede; ion (com elemento químico); Wyck (símbolo Wyckoff - ex.: 2a, 4c, 16h, etc.); posições atômicas (x,y,z); SOF (ocupação - em geral, igual a 1); B (fator térmico - pode ser digitado 1) e name (identificação - pode ser qualquer). Clicar em OK. Recomenda-se salvar o arquivo clicando em <File> + <Save>. No caso de dúvidas, consulte um exemplo.

Exemplo: **Er₂O₃**

Rede: cúbica

Parâmetro de rede: $a=10.547 \text{ \AA}$

Grupo espacial: $I a 3 (\#206)$

Posições atômicas:

átomo	posição Wyckoff	x	y	z	B(Å ²)	S (ocupação)
Er (1)	8b	1/4	1/4	1/4	1	1
Er (2)	24d	0.9646	0	1/4	1	1
O	48e	0.391	0.152	0.379	1	1

3) Exercício:

- Procure os dados da estrutura cristalina da fase identificada na aula prática nº 2.
- Faça uma simulação do difratograma.
- Faça uma comparação do difratograma experimental com o simulado

Bibliografia:

- Metals Handbook, American Society for Metals (1985).
- P.Villars and L.D.Calvert, Pearson's handbook of crystallographic data for intermetallic phases, American Society for Metals (1991).
- Powder Diffraction File, International Centre for Diffraction Data, Swarthmore, P.A. (1978)
- R.W.G.Wyckoff, Crystal structures, v.1, Interscience Publishers (1965).

W. Kraus and G. Nolze; "POWDERCELL - a program for representation and manipulation of crystal structures and calculations of the resulting X-ray powder patterns"; J. Appl. Cryst. (1996) v.29 p.301-303

http://www.bam.de/a_v/v_1/powder/e_cell.html

http://users.omskreg.ru/~kolosov/bam/a_v/v_1/powder/e_cell.htm