

049

ESTUDOS E APLICAÇÕES DA TÉCNICA DE REFINAMENTO ESTRUTURAL DE DIFRATOGRAMAS RAIOS-X. Ana P. L. Wagner, Éder J. Kinast, Carlos A. dos Santos, João B. M. da Cunha (Laboratório Mössbauer, Departamento de Física, Instituto de Física, UFRGS).

O refinamento estrutural pelo método Rietveld é uma importante técnica de caracterização de materiais utilizada no IF-UFRGS. Consiste de um algoritmo numérico em forma de um programa computacional que ajusta difratogramas de raios-X com base em modelos conhecidos, utilizando o método dos mínimos quadrados. O presente trabalho consiste do estudo e aplicação desta técnica em padrões de amostras com procedências diversas. (Laboratório Mössbauer do IF-UFRGS, IF-UFF e Universidad Nacional de Córdoba, Argentina.) Foram investigados processos de convergência do refinamento, ordenamento dos parâmetros refináveis, erros máximos nos parâmetros iniciais, refinamento de múltiplas fases, indexação das reflexões de Bragg, bem como formas de visualização de estruturas e padrões refinados. (FAPERGS, CNPq).