

1º Ciclo de Minicursos de Cristalografia

Refinamentos sequenciais e paramétricos.

Data: 25 a 28 de julho de 2016.

Local: IFSC-USP, São Carlos - SP.

Público alvo: Alunos de programas de pós-graduação, professores universitários, colaboradores de indústria.

Carga horária: O curso será realizado em 4 dias (32 horas), sendo que 8 horas serão dedicadas à teoria sobre difração de raios X e cristalografia.

Informações Gerais: A Bruker-Brasil irá fornecer licenças temporárias do Topas para os participantes. As licenças irão valer apenas para os dias de aula e no local das aulas.

Instrutores e palestrantes:

Instituto de Química - Unesp. Araraquara-SP.
Carlos O. Paiva Santos (COPS), Diego Luis Tita (DLT),
Jorge Manuel Vieira Capela (JMVC), Julia Sawaki Tanaka
(JST), Marisa Veiga Capela (MVC), Selma Gutierrez
Antonio (SGA).

Análises estatísticas: MVC

Método de mínimos-quadrados: JST

Modelos cinéticos: JMVC

Método de Rietveld e paramétricos: COPS, DLT, SGA

1º dia. Teoria

8:00: Abertura. Apresentação dos instrutores e da filosofia do curso.

8:30: Lei de Bragg. Cella unitária e índice de Miller.

9:30: Rede cristalina e tipos de celas unitárias.

10:00: Intervalo

10:20: Elementos de simetria e grupos espaciais. Interpretação do símbolo do grupo espacial.

11:20: Fator de estrutura. Multiplicidade de um sítio e fator de ocupação.

12:00 – 13:45: Almoço

14:00: O método de mínimos-quadrados.

15:00: Análises estatísticas.

16:00: Intervalo

16:15: Apresentação da Bruker-Brasil pelo Engenheiro João Fiori.

17:00: Modelos cinéticos de transformação de fases obtidos através de análise térmica.

Tutoriais e seminários

T: Instalação dos programas JEdit e Topas.

S: Como realizar coleta de dados. Cuidados necessários com fendas, "faca", porta-amostras, etc.

- ✓ Orgânicos
- ✓ Inorgânicos

T: O editor JEdit, o software Topas.

S: Método de Rietveld e Refinamentos sequenciais e paramétricos.

T/S: Como organizar os dados para os refinamentos.

- ✓ Usando arquivo RAW-Bruker
- ✓ Usando dados convertidos *.dat, *.xy

T/S: Modos para refinamentos sequenciais.

- ✓ *sequencial.bat* e *inicial.inp*
- ✓ *sequencial.inp*

T: Uso da planilha Excel ou LibreOffice Calc para gerar um arquivo sequencial ou paramétrico. **Modelo de Diego Luiz Tita.**

T: Análise do refinamento sequencial em uma planilha Excel ou LibreOffice Calc.

T: Introduzindo as equações no *parametrico.inp*.

T: Análise do resultado do refinamento paramétrico.