

[Painel - 14:00]

**INDEXAÇÃO DE UM DIAGRAMA DE  
DIFRAÇÃO MÚLTIPLA COM ALTA  
DENSIDADE DE REFLEXÕES  
SECUNDÁRIAS**

LUIZ CARLOS DE CAMPOS, CARLOS BENEDICTO  
RAMOS PARENTE, VERA LUCIA MAZZOCCHI  
*Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares*  
IPEN-CNEN/SP.

Este trabalho faz parte de um estudo mais amplo, que visa desenvolver uma metodologia de determinação de parâmetros de rede dos sistemas cristalinos de maior simetria, utilizando difração múltipla de nêutrons ou de raios-X. O primeiro sistema abordado, ainda em estudo, foi o hexagonal. Para esse estudo, está sendo utilizado um difratograma experimental da reflexão primária 00.1 do quartzo na fase beta, obtido na temperatura de 730 graus Celsius com nêutrons. A indexação desse diagrama mostrou uma alta densidade de reflexões secundárias. Porém, o diagrama experimental apresenta uma baixa densidade de picos. Neste caso, existe uma dificuldade em se determinar, inequivocamente, qual a

reflexão secundária predominante para cada pico, uma vez que existem várias reflexões secundárias que aparentemente contribuem para o pico considerado. A fim de solucionar esse problema, utilizamos o programa MULTI, que simula difratogramas teóricos a partir das soluções de intensidade. Foi feita a simulação dos picos de interesse, para um conjunto de valores de um dos parâmetros da rede, enquanto o outro foi mantido fixo. Cada pico das diversas simulações realizadas foi ajustado a uma Gaussiana, utilizando-se um programa de ajustes por mínimos quadrados (programa GAUSS). A variação da posição angular azimutal das Gaussianas, ajustadas a um determinado pico, foi comparada àquela obtida com o programa de indexação (INDEXHEX). A comparação permitiu identificar inequivocamente a reflexão secundária responsável pela formação do pico. Apoio Financeiro: Universidade de Mogi das Cruzes (UMC), Pontifícia Universidade Católica de São Paulo (PUC-SP) e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

**PRODUÇÃO TÉCNICO CIENTÍFICA  
DO IPEN  
DEVOLVER NO BALCÃO DE  
EMPRÉSTIMO**

9009