

092

EFEITOS DE PARÂMETROS EXPERIMENTAIS E COMPUTACIONAIS SOBRE A QUALIDADE DE REFINAMENTOS ESTRUTURAS A PARTIR DE DIFRAÇÃO DE RAIOS X. *Éder J. Kinast, Carlos A. dos Santos, Lívio Amaral.* (Departamento de Física, Instituto de Física, UFRGS).

O Método Rietveld consiste num algoritmo, através do qual é ajustada uma curva teórica sobre pontos experimentais de um difratograma de raios X. Tal algoritmo refina por meio de métodos numéricos uma série de parâmetros estruturais inicialmente arbitrados. Alguns desses parâmetros são estritamente controlados durante o processo de medida, enquanto outros são relacionados também com o processo de tratamento numérico. O presente trabalho é um estudo sobre alguns dos parâmetros. Deseja-se saber quais os efeitos de suas variações sobre a qualidade do ajuste, tanto em termos dos valores R de Rietveld (parâmetros de qualidade de ajuste) como em informações sobre a significação física dos resultados obtidos. Ainda é feito um estudo sobre a amplitude de divergência nos valores iniciais em relação aos valores teóricos reais. (CNPq-PIBIC/UFRGS).