

145

APRENDIZADO E APLICAÇÃO DO PROGRAMA FULLPROF PARA REFINAMENTO ESTRUTURAL A PARTIR DO MÉTODO RIETVELD. *Lizandra Guerra, Éder J. Kinast, João B. M. da Cunha* (Laboratório Mössbauer, Departamento de Física, Instituto de Física, UFRGS).

O refinamento estrutural pelo método Rietveld é largamente empregado para resolução de estruturas cristalinas no estudo da Física da Matéria Condensada. Tal método consiste do ajuste de picos de difração de raios-X, no caso feito através do programa Fullprof (desenvolvido pelo LLB/França), que aplica o método dos mínimos quadrados. Além disso, por ser uma ferramenta básica para resolução de estruturas, é objetivo que novos bolsistas aprendam a utilizá-la. Foram abordados tópicos de algoritmos numéricos de refinamento, a técnica experimental de raios-X e conhecimentos básicos de estado sólido. Serão discutidos alguns exemplos de refinamentos a partir de amostras estudadas no Laboratório Mössbauer.