

Autor: George Gilberto Gomes Júnior

Orientadores: Isabel Pereira Ludka e Hélio Salim de Amorim

Título: **Automação do Difratorômetro de Raios-X para Policristais Philips PW 1850/25: uma contribuição para a otimização da análise de amostras de interesse geológico**

Nº de páginas: 140

### **Resumo:**

Neste trabalho apresentamos uma proposta para automação do difratorômetro de policristais Philips PW 1850/25, do departamento de Geologia, e seus equivalentes, para coleta e tratamento de dados, com o principal objetivo

Programa de Pós-Graduação em Geologia  
*Dissertações - Mestrado*

de aumentar a capacidade de análise de amostras de interesse geológico. Incluem-se entre as principais preocupações, as análises qualitativas e quantitativas de fases minerais e o refinamento de estruturas. Com esse trabalho, temos como objetivo modernizar pelo menos outros cinco difratômetros PW 1850/25 existentes na UFRJ. A presente proposta envolve o emprego de computadores do tipo PC como base de controle e armazenamento de dados, placas comerciais de aquisição de dados para PC, motor de passo, e software de controle. Como teste de desempenho do projeto, algumas amostras minerais são analisadas, simulando atividades de rotina de um laboratório de difração de raios x dedicado a problemas de Geologia. Identificamos e refinamos três amostras de carbonato das localidades: Santo Inácio (calcita –  $\text{CaCO}_3$ ),  $a = 4.998(2)\text{Å}$  e  $c = 17.088(2)\text{Å}$ ; Indaiá e Limeira, contendo duas fases presentes: calcita ( $a = 4.995\text{Å}$  (3) e  $c = 17.085(2)\text{Å}$ ) e magnesita ( $(\text{Mg,Ca})\text{CO}_3$ ),  $a = 4.614(2)\text{Å}$ ,  $c = 14.935(1)\text{Å}$ , da região de Coromandel - MG. Identificamos e refinamos uma amostra de ilmenita ( $\text{FeTiO}_3$ ),  $a = 5.0884(4)\text{Å}$  e  $c = 14.0855(3)\text{Å}$ . Refinamos uma mistura de duas amostras sintéticas: quartzo ( $\text{SiO}_2$  -  $a = 4.9134(2)\text{Å}$  e  $c = 5.4052(3)\text{Å}$ ) e alumina ( $\text{Al}_2\text{O}_3$  -  $a = 4.758(2)\text{Å}$ ,  $c = 12.997(1)\text{Å}$ ) para determinações quantitativas. As amostras foram refinadas através do método de Rietveld e mostraram uma boa concordância com os resultados obtidos na literatura.