

Análise quantitativa de fases com o Topas Academic. Dados do Rigaku-Rint2000.

Vamos começar fazendo o download dos dados obtidos no equipamento Rigaku RINT2000, com detector D/teX, raio 185mm, fenda de divergência 1.4°, Soller de 2.5° de divergência, radiação de cobre e filtro de níquel.

Os dados estão compactados com o [7-zip](#).

Baixe os dados aqui: http://labcacc.net.br/Tutoriais_Topas/qpa_cpd/Dados_Rint2000.7z

As amostras são as mesmas que fizeram parte do round Robin de análises quantitativa de fases. Assim, informações sobre o aqf-rr estão aqui:

Introdução: http://www.iucr.org/_data/iucr/powder/QARR/intro.htm

Proporção das fases: http://www.iucr.org/_data/iucr/powder/QARR/results.htm

A situação é a mesma que no exercício anterior: [Tutorial AQF Topas Academic.pdf](#)

Entretanto, uma “aberração” está presente. Efeito da absorção do filtro de níquel para monocromatizar o feixe de raios X.

A “correção” é realizada através da macro “Absorption_Edge_Correction”. Nesse exemplo ela foi incluída individualmente para cada conjunto de dados.

Faça o download do modelo abaixo e estude com cuidado. O descrição desse efeito está no manual ou nas referências técnicas, dependendo se está usando o Topas Academic ou Topas Bruker.

Cola: http://labcacc.net.br/Tutoriais_Topas/qpa_cpd/CPD1_RINT2000_TODOS.inp

Dados: http://labcacc.net.br/Tutoriais_Topas/qpa_cpd/Dados_Rint2000.7z

Por fim, examine o arquivo INP no jEdit para entender como foi organizado para refinar simultaneamente com os 8 conjuntos de dados.

Confira as frações mássicas obtidas com os [resultados do Round-Robin](#).

Boa sorte.

cops