
Exercice 1.3 :
Conversion de fichiers .cif et simulation de diagrammes de diffraction

Fichiers de travail (répertoire \ cif)

- cerusite.cif (PbCO_3)
- galena.cif (PbS)
- gypsum.cif ($\text{Ca}(\text{SO}_4)(\text{H}_2\text{O})_2$)
- laurionite.cif ($\text{Pb}(\text{OH})\text{Cl}$)
- phosgenite.cif ($\text{Pb}_2\text{Cl}_2(\text{CO}_3)$)

Dans EdPCR :

1. A l'aide de l'option «CIF to PCR», importer un fichier .cif contenant des informations structurales
2. Editer le fichier .pcr ainsi créé
3. Exécuter le programme FullProf
4. Visualiser le diagramme simulé (.prf, .sim) avec WinPLOT

Différentes simulations peuvent être effectuées à partir des différents fichiers cif proposés et en utilisant des paramètres instrumentaux particuliers à partir de la lecture de fichiers de résolution instrumentale (fichiers .irf). Comparer par exemple les diagrammes de diffraction simulés pour un même composé, en diffraction X et diffraction neutronique.