

Base de dados de estruturas cristalinas - CAPES

José Marcos Sasaki e Paulo Victor Eufrásio

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici, CP 6030, 60455-760, Fortaleza, CE, Brazil

No ano passado foi adquirido pela Capes três bases de dados que são de fundamental importância para a comunidade científica em ciências de materiais:

ICSD: é um banco de dados numérico na qual contém uma completa informação de estrutura cristalina de compostos inorgânicos e um software de procura, cálculos, visualização em 3D de estrutura e visualização de gráficos;

CrystMET: contém dados químicos (metais e intermetálicos), cristalográficos e bibliográficos juntamente com comentários referentes a detalhes experimentais;

Phase Diagram database: é um portal de acesso de materiais químicos e diagrama de fase.

Essas bases, atualizadas trimestralmente, são ricas em informações tais como: referências, coordenadas atômicas, parâmetros de rede, grupo espacial e etc. sendo acessíveis por meio de programa específico de busca. Grande parte dessas bases são de materiais de estado sólido inorgânicos de aplicação imediata em ciências de materiais. Nessa apresentação serão mostrados os diversos aplicativos (software) que podem ser desenvolvidos a partir das bases de dados.

Os interessados em serem usuários podem solicitar o seu login e senha de acesso preenchendo o cadastro que se encontra no seguinte endereço: http://www.portaldapesquisa.com.br/databases/sites?cust=capex&perfil=lnls&action=pdp_cad&pdpcadaction=home&style=capex.

Agradecimentos: Capes e DotLib