|  |  |
| --- | --- |
| color_1024x768 | **UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA****PROGRAMA DE DISCIPLINA** |

 DEPARTAMENTO:

|  |
| --- |
| **QUÍMICA** |

 IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| CÓDIGO | NOME (CARGA HORÁRIA - CRÉDITOS) | CARÁTER |
| **QMC1812** | **Cristalografia Aplicada (45-3)** | **Eletiva** |

 EMENTA:

|  |
| --- |
| Apresentar a aplicação de métodos modernos de cristalografia avançada. O aluno deve entender os fundamentos físicos de cristalografia e saber como aplicar a os fundamentais para resolver as situações não rotinas, como geminação, desordem posicional, dinâmica e complexa, pseudo-simetria e simetria meroédrica. O aluno dever saber como usar os recursos disponíveis para validar uma estrutura cristalina.  |

 PROGRAMA:

|  |
| --- |
| TÍTULO E DISCRIMINAÇÃO DAS UNIDADES |
| UNIDADE 1 - SIMETRIA EM CRISTAIS1.1 - Elementos de simetria 1.2 – Retículos1.3 - Grupos pontuais e espaciais1.4 - *International Tables of Crystallography*UNIDADE 2 - COMPUTAÇÃO CRISTALOGRÁFICA2.1 – Transformações de cela2.2 - Operações nos retículos: cela reduzida de Niggli, sob- e super-retículos, geminação.2.3 - Fatores estruturais 2.4 - Cálculo de densidade eletrônica2.5 - Método de quadrados mínimos2.6 - Moção termal2.7 - Parâmetros e suas incertezas padrõesUNIDADE 3 - MÉTODOS EXPERIMENTAIS EM CRISTALOGRAFIA3.1 – Fontes de raios-X3.2 - Coleta de dados para monocristal 3.3 - Coleta de dados para material policristalino3.4 - Redução de dados3.5 - Uso dos programas computacionais para redução dos dadosUNIDADE 4 - SOLUÇÃO E REFINAMENTO DE ESTRUTURAS CRISTALINAS 4.1 - Estatísticas de amplitudes dos fatores estruturais 4.2 – Patterson, métodos diretos e “charge flipping”4.3 - Refinamento da estrutura4.4 - Configuração absoluta |
| 4.5 - Método de Reitveld4.6 - Arquivo de informações cristalográficas, CIF4.7 - Uso dos programas computacionais para solução e refinamento de estruturaUNIDADE 5 - DIAGNOSTICANDO E RESOLVENDO PROBLEMAS CRISTALOGRÁFICOS 5.1 – Interpretação da estrutura5.2 - Desordem: substituicional, posicional, complexa.5.3 - Geminação: meroédrica, pseudo-meroédrica e não-meroédrica 5.4 - “Constraints” e “restraints”5.5 - Pseudo-simetria5.6 - Artefatos5.7 - Validação da estrutura 5.8 - Uso dos programas computacionais para diagnosticar e resolver problemas cristalgráficos |

 BIBLIOGRAFIA:

|  |
| --- |
| BIBLIOGRAFIA BÁSICA E COMPLEMENTAR |
| HAMMOND, C.; **The Basics of Crystallography and Diffraction**, Oxford University Press, Oxford, 2001.GIACOVAZZO, C.; **Fundamentals of Crystallography**, 3rd Ed., Oxford University Press, Oxford, 2011.STOUT, G. H.; JENSEN, L. H.; **X-Ray Structure Determination**, 2nd Ed., John Wiley & Sons, New York, 1989.LADD, M.; PALMER, R.; **Structure Determination-Ray Crystallography**, 5th Ed., Springer Science, New York, 2013. MASSA, W.; **Crystal Structure Determination**, 2nd Ed., Springer-Verlag, Berlin, 2004.MÜLLER, P.; **Crystal Structure Refinement: A Crystallographer's Guide to SHELXL**, Oxford University Press, Oxford, 2006.Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.  |
| Data: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Coordenador do Curso | Data: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Chefe do Departamento |