|  |  |
| --- | --- |
| 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 CRISTAIS  1.1 - Elementos de simetria  1.2 – Retículos  1.3 - Grupos pontuais e espaciais  1.4 - *International Tables of Crystallography*  UNIDADE 2 - COMPUTAÇÃO CRISTALOGRÁFICA  2.1 – Transformações de cela  2.2 - Operações nos retículos: cela reduzida de Niggli, sob- e super-retículos, geminação.  2.3 - Fatores estruturais  2.4 - Cálculo de densidade eletrônica  2.5 - Método de quadrados mínimos  2.6 - Moção termal  2.7 - Parâmetros e suas incertezas padrões  UNIDADE 3 - MÉTODOS EXPERIMENTAIS EM CRISTALOGRAFIA  3.1 – Fontes de raios-X  3.2 - Coleta de dados para monocristal  3.3 - Coleta de dados para material policristalino  3.4 - Redução de dados  3.5 - Uso dos programas computacionais para redução dos dados  UNIDADE 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 estrutura  4.4 - Configuração absoluta |
| 4.5 - Método de Reitveld  4.6 - Arquivo de informações cristalográficas, CIF  4.7 - Uso dos programas computacionais para solução e refinamento de estrutura  UNIDADE 5 - DIAGNOSTICANDO E RESOLVENDO PROBLEMAS CRISTALOGRÁFICOS  5.1 – Interpretação da estrutura  5.2 - Desordem: substituicional, posicional, complexa.  5.3 - Geminação: meroédrica, pseudo-meroédrica e não-meroédrica  5.4 - “Constraints” e “restraints”  5.5 - Pseudo-simetria  5.6 - Artefatos  5.7 - 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 | |