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

 DEPARTAMENTO:

|  |
| --- |
| **QUÍMICA** |

 IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| CÓDIGO | NOME (CARGA HORÁRIA - CRÉDITOS) | CARÁTER |
| **QMC1813** | **Cristaloquímica de Difração de Raios-X (45-3)** | **Eletiva** |

 EMENTA:

|  |
| --- |
| Geração e propriedades de raios-X. Interação de raios-X com a matéria. Outros efeitos de raios-X. Monocromatização de raios-X. A reflexão como modelo para a difração. Propriedades características de cristais. Difratômetro de raios-X para monocristal. Interpretação de difratogramas. Teoria dos grupos espaciais. Solução e interpretação de estruturas cristalinas e moleculares. Interações secundárias no estado sólido. Aplicações gerais da Cristalografia. Correlação da Cristalografia com outros métodos instrumentais de análise. |

 PROGRAMA:

|  |
| --- |
| TÍTULO E DISCRIMINAÇÃO DAS UNIDADES |
| UNIDADE 1 – GENERALIDADES ENVOLVENDO RAIOS-X1.1 - Análise estrutural cristalina por difração de raios-X comparada a microscopia clássica1.2 - Geração e propriedades de raios-X. Geradores de raios-X. Radioproteção.1.3 - Tubo de raios-X: Construção; Cuidados e precauções; Radiação por fretamento de elétrons; Radiação característica1.4 - Interação de Raios-X com a Matéria: Absorção; Filtros1.5 - Monocromatização de raios-X: cristais como monocromadores – monocromador de feixes paralelos. Idem com feixes focados1.6 - Outros efeitos de raios-X: Efeito foto-elétrico; Efeito Compton; Interferência (cristal como uma fenda tridimensional)UNIDADE 2 – REDE CRISTALINA2.1 - Redes cristalinas: Descrição e parâmetros; Cela unitária e condições de escolha; Classe cristalina; Rede de Bravais; Índices de Miller; Direção e zona cristalográfica; Simetria de difração2.2 - A rede recíproca: Descrição; Reflexão como modelo para a difração (condição de reflexão em redes cristalinas); A equação de Bragg; Círculo e Esfera de Ewald como condição de difração; Aplicação (método do cristal rotatório); Difratogramas (método de BUERGER); Informações contidas em um difratograma2.3 - Propriedades características de cristais: Homogeniedade; Anisotropia; Cela unitária2.4 - Difratômetro de raios-X para monocristal: princípios fundamentais de construção e funcionamentoUNIDADE 3 – GRUPOS ESPACIAIS3.1 - Elementos de simetria - simbologia de Hermann-Maugin e correlação com as simbologias de Mulliken e de Schoenflies |

|  |
| --- |
| 3.2 - Discussão de celas elementares genéricas envolvendo equivalência por operações de simetria em motivos cristalográficos na parte assimétrica. Construção de grupos espaciais com interpretação de operadores de simetria 3.3 - Simetria da rede tridimensional. Classes cristalina. Simetria de Laue3.4 - Formalismo envolvendo a interpretação de grupos espaciais unidimensionais, bidimensionais e tridimensionais3.5 - Formalismo da transformação de grupos espaciais incluindo referência padrão. Matrizes de transformação de coordenadas cristalográficasUNIDADE 4 – SOLUÇÃO DA ESTRUTURA MOLECULAR E CRISTALINA4.1 - Fase de uma onda. Representação no plano complexo e interpretação da contribuição de espalhamento de átomos contidos em um plano em condição de espalhamento. Dedução e interpretação do formalismo correspondente ao fator estrutural (amplitude de uma estrutura)4.2 - O Problema da Fase4.3 - Interpretação da solução do Problema da Fase com o formalismo da Síntese de Fourier e Fourier Inversa. Representação do mapa da densidade eletrônica e correlação com a estrutura molecular4.4 - Discussão das bases envolvendo os métodos de solução de estrutura molecular: Métodos Diretos. Método de Patterson com dedução da Síntese de Patterson e comentários da simetria dos grupos correspondentes – Grupos de Patterson. Exemplos de solução de estrutura: simetria baseadas em linhas e planos de HarkerUNIDADE 5 – A ESTRUTURA CRISTALINA E MOLECULAR5.1 - Interpretações de estruturas cristalinas e moleculares: representações gráficas. Efeitos de desordem posicional de átomos 5.2 - Interações inter e intramoleculares - interações secundárias por ligações não-covalentes5.3 - Arranjos supramoleculares e suas dimensionalidadesUNIDADE 6 – CAMPOS DE APLICAÇÃO DA CRISTALOGRAFIA6.1 - Polimorfismo6.2 - Estratégia para a arquitetura molecular com alvo específico de aplicaçãoUNIDADE 7 – CORRELAÇÃO DA CRISTALOGRAFIA COM OUTROS MÉTODOS ANALÍTICOS7.1 - Difratometria em amostras pulverizadas7.2 - Fluorescência de raios-X7.3 - Métodos espectroscópicos |

 BIBLIOGRAFIA:

|  |
| --- |
| BIBLIOGRAFIA BÁSICA E COMPLEMENTAR |
| WELLS, A. F.; **Structural Inorganic Chemistry**, Clarendon Press, G. Britain, 1986.STOUT, G. H.; JENSEN, L. H.; **X-Ray Structure Determination - A Pratical Guide**, 2nd Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 1989.LUGER, P.; **Modern X-Ray Analysis on Single Crystals**, Walter de Gruyter, Berlin, 1980.HAMMOND, C.; **The Basics of Crystallography and Diffraction,** Oxford University Press, Oxford, 1997.WOOLFSON, M. M.; **An Introduction to X-Ray Crystallography**, 2nd Ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1997.DESIRAJU, G. R.; STEINER, J.; **The Weak Hydrogen Bond In Structural Chemistry and Biology**, Oxford University Press, Oxford, 1999.**International Tables for Crystallography**, Volume A, Edited by Theo Hahn, Fifth Edition, The International Union of Crystallography/Springer, 2005.Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.  |
| Data: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Coordenador do Curso | Data: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Chefe do Departamento |