|  |  |
| --- | --- |
| 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-X  1.1 - Análise estrutural cristalina por difração de raios-X comparada a microscopia clássica  1.2 - 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 característica  1.4 - Interação de Raios-X com a Matéria: Absorção; Filtros  1.5 - Monocromatização de raios-X: cristais como monocromadores – monocromador de feixes paralelos. Idem com feixes focados  1.6 - Outros efeitos de raios-X: Efeito foto-elétrico; Efeito Compton; Interferência (cristal como uma fenda tridimensional)  UNIDADE 2 – REDE CRISTALINA  2.1 - 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 difração  2.2 - 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 difratograma  2.3 - Propriedades características de cristais: Homogeniedade; Anisotropia; Cela unitária  2.4 - Difratômetro de raios-X para monocristal: princípios fundamentais de construção e funcionamento  UNIDADE 3 – GRUPOS ESPACIAIS  3.1 - 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 Laue  3.4 - Formalismo envolvendo a interpretação de grupos espaciais unidimensionais, bidimensionais e tridimensionais  3.5 - Formalismo da transformação de grupos espaciais incluindo referência padrão. Matrizes de transformação de coordenadas cristalográficas  UNIDADE 4 – SOLUÇÃO DA ESTRUTURA MOLECULAR E CRISTALINA  4.1 - 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 Fase  4.3 - 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 molecular  4.4 - 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 Harker  UNIDADE 5 – A ESTRUTURA CRISTALINA E MOLECULAR  5.1 - 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-covalentes  5.3 - Arranjos supramoleculares e suas dimensionalidades  UNIDADE 6 – CAMPOS DE APLICAÇÃO DA CRISTALOGRAFIA  6.1 - Polimorfismo  6.2 - Estratégia para a arquitetura molecular com alvo específico de aplicação  UNIDADE 7 – CORRELAÇÃO DA CRISTALOGRAFIA COM OUTROS MÉTODOS ANALÍTICOS  7.1 - Difratometria em amostras pulverizadas  7.2 - Fluorescência de raios-X  7.3 - 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 | |