



INSTITUTO DE QUÍMICA da UFRJ
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÂNICA

Programa de Disciplina

Nome: **Introdução à Cristalografia**

Código: **IQG 483**

CARACTERÍSTICAS

| | |
|--|---|
| Categoria: | ELETIVA |
| Carga Horária Semanal: | 4 (TEÓRICA) |
| Número de Semanas Previstas para a Disciplina: | 15 |
| Número de Créditos da Disciplina: | 4 |
| Pré-Requisito para a Disciplina: | QUÍMICA DE SÓLIDOS (IQG 242) |
| Cursos para os quais a Disciplina é Indicada: | QUÍMICA QUÍMICA - ATRIBUIÇÕES TECNOLÓGICAS |



INSTITUTO DE QUÍMICA da UFRJ

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÂNICA

PROGRAMA ANALÍTICO

- 1 CRISTAIS (CARGA HORÁRIA RECOMENDADA 6 HORAS)**
 - 1.1 Rede real
 - 1.2 Rede recíproca
 - 1.3 Caracterização morfológica e óptica de monocristais

- 2 SIMETRIA CRISTALINA (CARGA HORÁRIA RECOMENDADA 10 HORAS)**
 - 2.1 Grupos pontuais
 - 2.2 Grupos espaciais
 - 2.3 Redes de Bravais
 - 2.4 Sistemas cristalinos

- 3 INTERAÇÃO DOS RAIOS X COM A MATÉRIA (CARGA HORÁRIA RECOMENDADA 10 HORAS)**
 - 3.1 Espalhamentos Thomson e Compton
 - 3.2 Modelos de Bragg e de Laue
 - 3.3 Esfera de Ewald e condições limites de difração

- 4 TRANSFORMADA DE FOURIER E APLICAÇÃO EM CRISTALOGRAFIA (CARGA HORÁRIA RECOMENDADA 8 HORAS)**
 - 4.1 Transformada de Fourier
 - 4.2 Exemplos de transformações
 - 4.3 Fator de espalhamento atômico
 - 4.4 Fator de estrutura

- 5 MEDIDAS EXPERIMENTAIS (CARGA HORÁRIA RECOMENDADA 8 HORAS)**
 - 5.1 Geração e propriedades dos raios X
 - 5.2 Descrição dos componentes de um difratômetro
 - 5.3 Difração por materiais policristalinos



INSTITUTO DE QUÍMICA da UFRJ
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÂNICA

5.4 Difração por monocristais

6 MÉTODOS DE DETERMINAÇÃO DE ESTRUTURA (CARGA HORÁRIA RECOMENDADA 10 HORAS)

6.1 Introdução aos métodos diretos

6.2 A função de Patterson

7 INTRODUÇÃO AO REFINAMENTO DE ESTRUTURAS CRISTALINAS (CARGA HORÁRIA RECOMENDADA 8 HORAS)

7.1 Método dos mínimos quadrados

7.2 Mapas de diferença de Fourier

LIVROS RECOMENDADOS.

- 1 C. HAMMOND; “The Basics of Crystallography and Diffraction – IUCr Texts on Crystallography 3; Oxford University Press, New York, 1997.
- 2 M.F.C. LADD, R.A. PALMER; “Structure determination by X-ray crystallography” 3rd edition; Plenum Press, New York; 1994.
- 3 C. GIACOVAZZO, H.L. MONACO, G. ARTIOLI, G. FERRARIS, G. GILLI, G. ZANOTTI, M. CATTI; “Fundamentals of Crystallography”; 2nd edition – IUCr Texts on Crystallography 2; Oxford University Press; 2002.
- 4 M.M. WOOLFSON; “An Introduction to X-Ray Crystallography”; 2nd edition; Cambridge University Press; Cambridge; 1997.
- 5 International Union on Crystallography Teaching Pamphlets on Crystallography (<http://www.iucr.org/education/pamphlets>).