

Caracterização da disciplina

Código disciplina:	da	NHZ3082-15	Nome da disciplina:	CRISTALOGRAFIA E DIFRAÇÃO DE RAIOS X			
Créditos (T-P-I):	(3-1-4)	Carga horária:	48 horas	Aula prática:	X	Câmpus:	Santo André
Código turma:	da	DANHZ3082-15SA	Turma:	A	Turno:	Diurno	Quadrimestre: 3 Ano: 2016
Docente(s) responsável(is):		Roosevelt Droppa Jr.					

Alocação da turma

	Segunda	Terça	Quarta	Quinta	Sexta	Sábado
8:00 - 9:00						
9:00 - 10:00						
10:00 - 11:00						
11:00 - 12:00						
12:00 - 13:00						
13:00 - 14:00						
14:00 - 15:00	X					
15:00 - 16:00	X					
16:00 - 17:00			X			
17:00 - 18:00			X			
18:00 - 19:00						
19:00 - 20:00						
20:00 - 21:00						
21:00 - 22:00						
22:00 - 23:00						

Planejamento da disciplina
Objetivos gerais

- Introduzir conceitos básicos de cristalografia.
- Apresentar de forma detalhada a teoria de difração de raios X.
- Desenvolver a habilidade de interpretação de difratogramas e figuras de difração.
- Apresentar as principais técnicas experimentais de difração de raios X.

Objetivos específicos
Ementa

Redes e sistemas cristalinos, grupos espaciais e simetria, produção de raios X, difração por redes de átomos, determinação de estruturas cristalinas, técnicas experimentais de difração de raios X, outras técnicas de difração.

Conteúdo programático

Aula	Conteúdo	Estratégias didáticas	Avaliação
1	Cristais e estruturas cristalinas: famílias e sistemas cristalinos, morfologia e classes cristalinas, determinação e descrição de estruturas cristalinas, exemplos de estruturas, densidade de um cristal.	Aula expositiva	
2	Retículos, planos e direções: retículos bi- e tridimensionais, celas unitárias, direções.	Aula expositiva	
3	Retículos, planos e direções: planos do retículo, índices de Miller, retículos hexagonais, espaço recíproco.	Aula expositiva	
4	Simetria em 2 dimensões: padrões, mosaicos, simetria pontual, simetria de rotação, simetria de retículos planos, grupos pontuais planos.	Aula expositiva	
5	Simetria em 2 dimensões: simetria de padrões, grupos planos, posições genéricas e especiais, mosaicos.	Aula expositiva	
6	Simetria em 3 dimensões: simetria pontual de um objeto, eixos de inversão, símbolos de Hermann-Mauguin.	Aula expositiva	

7	Simetria em 3 dimensões: simetria dos retículos de Bravais, grupos pontuais cristalográficos, simetria e propriedades físicas dos materiais.	Aula expositiva	Primeira prova
8	Revisão.		
9			
10	Estruturas cristalinas a partir de retículos - grupos espaciais: grupos espaciais, grupos espaciais cristalográficos, símbolos de simetria, representação gráfica dos grupos espaciais, construção de uma estrutura a partir dos grupos espaciais, exemplos.	Aula expositiva	
11	Difração e estruturas cristalinas: lei de Bragg, geometria de um padrão de difração, tamanho de partícula.	Aula expositiva	
12	Difração e estruturas cristalinas: intensidades dos feixes difratados, fator de espalhamento atômico, fator de estrutura, cálculo do fator de estrutura, simetria e intensidades das reflexões, fator de temperatura, difração de pó.	Aula expositiva	
13	Difração e estruturas cristalinas: microscopia eletrônica e imagens, determinação da estrutura por difração de raios X, difração de nêutrons, cristalografia de proteínas, o problema da fase.	Aula expositiva	
14	Representação de estruturas cristalinas: raios atômicos, estruturas iônicas e regras de construção, modelo de valência de ligação.	Aula expositiva	
15	Experimento I: experimento de Laue.	Aula prática	
16	Experimento II: difração de policristais.	Aula prática	
17	Representação de estruturas cristalinas: estruturas em termos de empacotamentos, representações de cristais por poliedros e redes, representação de estruturas orgânicas e proteínas.	Aula expositiva	

18	Experimento III: determinação da constante de retículo de monocristais.	Aula prática	
19	Defeitos, estruturas moduladas e quasicristais: fatores de ocupação, parâmetros de cela, densidade, estruturas modulares, estruturas incomensuradamente moduladas, quasicristais.	Aula expositiva	
20	Experimento IV: análise da estrutura de monocristais de NaCl com diferentes orientações.	Aula prática	
21	Revisão.	Aula expositiva	
22			Segunda prova
23	Reposição de experimentos.	Aula prática	
24			Prova substitutiva

Descrição dos instrumentos e critérios de avaliação qualitativa

Participação ativa em aula e em laboratório.

Referências bibliográficas básicas

1. TILLEY, R.J.D. *Cristalografia Cristais e Estruturas Cristalinas*, Oficina de textos, 2014.
2. PECHARSKY V. and ZAVALIJ P. *Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials*, Springer, 2009.
3. DE GRAEF, M., MCHENRY, M.E. *Structure of Materials An Introduction to Crystallography, Diffraction and Symmetry*, Cambridge University Press, 2012.

Referências bibliográficas complementares

1. CULLITY, B.D. *Elements of X-Ray Diffraction*, Addison-Wesley, 1978.
2. MASSA, W. *Crystal Structure Determination*, Springer, 2004.
3. GUINIER, A. *X-Ray Diffraction in Crystals, Imperfect Crystals, and Amorphous Bodies*, Dover, 1994.
4. KLUG, H. P. and ALEXANDER, L. E. *X-Ray Diffraction Procedures*, Wiley-Interscience, 1974.
5. WARREN B. E. *X-Ray Diffraction*, Dover, 1990.