



PLANO DE ENSINO – semestre 2018.1

I. IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA			
CÓDIGO	NOME DA DISCIPLINA	Nº de Horas-Aula Semanais	Total de Horas/Aula Semestrais
QMC 3105	Cristalografia	4	60

II. PROFESSOR MINISTRANTE
Prof. Adailton J. Bortoluzzi

III. EMENTA (a mesma cadastrada no Sucupira)
Operações de simetria. Grupos pontuais e grupos espaciais. Sistemas cristalinos. Tipos de Bravais. Geração de raios-x, filtração e monocromatização. Difração de raios-x pelo cristal. Indexação das reflexões. Padrão de difração. Determinação de grupos espaciais. Entendimento do arquivo .res (Z, simetria, coordenadas, fatores de ocupação, desordem, parâmetros de refinamento). Entendimento dos dados cristalográficos (tabelas) e elaboração de figuras.

IV. OBJETIVOS
<p><u>Objetivos Gerais:</u> Dotar o aluno do conhecimento e entendimento dos tópicos básicos e fundamentais da cristalografia, conforme os itens descritos na ementa.</p> <p><u>Objetivos Específicos:</u> Após aulas expositivas, resolução de exercícios e de estudos individuais, o aluno deverá ser capaz de:</p> <ol style="list-style-type: none">1. Compreender e aplicar os elementos de simetria na cristalografia.2. Reconhecer e determinar sistemas cristalinos, tipos de Bravais e grupos espaciais.3. Interpretar a tabela de dados cristalográficos, verificar a coerência desses dados e entender a presença de sistemas desordenados.4. Elaborar tabelas e figuras para divulgação de resultados.

V. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO
<p>Conteúdo Teórico:</p> <p>01. Unidade I.</p> <ul style="list-style-type: none">- Elementos e operações de simetria- Grupos pontuais- Sistemas cristalinos- Tipos de Bravais- Grupos espaciais <p>02. Unidade II.</p> <ul style="list-style-type: none">- Geração de raios-x- Filtração e monocromatização de raios-x <p>03. Unidade III.</p> <ul style="list-style-type: none">- Difração de raios-x pelo cristal



- Indexação das reflexões
- Padrão de difração
- Determinação da cela unitária
- Simetria de Laue

04. Unidade IV.

- Determinação dos grupos espaciais
- Transformação de matrizes
- Aplicação

05. Unidade V.

- Arquivo .cif: entendimento e estrutura
- Fatores de ocupação e desordem
- Elaboração de tabelas e figuras

VI. METODOLOGIA DE ENSINO / DESENVOLVIMENTO DO PROGRAMA

Aulas teóricas com utilização de quadro negro/giz e projetor aliadas com algumas aulas práticas para fixação da aprendizagem.

VII. METODOLOGIA DE AVALIAÇÃO

Provas escritas e seminários

VIII. BIBLIOGRAFIA BÁSICA

1. PHILLIPS, F. Coles. An introduction to crystallography. 3rd ed. London: Longmans, c1963, impr. 1966.
2. WOOLFSON, M. M. An introduction to x-ray crystallography. Cambridge: The University-Press 1970.
3. BUNN, C. W. Chemical crystallography: an introduction to optical and X-ray methods. 2nd ed. Oxford: At the Clarendon Press, 1961, repr. 1967.
4. GIACOVAZZO, Carmelo. Fundamentals of crystallography. Oxford University Press, 1992.
5. Miller, Peter et al. Crystal structure refinement: a crystallographer's guide to SHELXL. Oxford University Press, 2006.
6. International Tables for Crystallography (www.iucr.org)
www.chem.gla.ac.uk/~louis/software/