

Título:

Difração de Raios X para Identificação e Caracterização de Materiais e Moléculas

Professor Responsável:

Prof. Carlos Basilio Pinheiro

Carga Horária:

Semanal: 4 horas

Total: 60 horas

Turno: Diurno

Pré-requisitos:

Geometria Analítica

Número Máximo de Alunos:

40

Forma de Avaliação:

Provas escritas e exercícios.

Ementa:

Definição de cristal, simetria e isomeria. Redes e sistemas cristalinos, grupos de ponto e de espaço e uso da Tabela Internacional de Cristalografia. Empacotamento atômico (estruturas HCP, CCP, BCC, etc.) e estruturas intersticiais (cristais diatômicos, grafite, diamante, entre outros). Interação da radiação com a matéria e espalhamento elástico de raios X. Difração por cristais tridimensionais, difração de policristais e filmes para identificação e caracterização de materiais. Análise qualitativa e quantitativa de fases pelo método de Rietveld. Difração de monocristais para solução e refinamento de estruturas de sólidos cristalinos.

Objetivos:

- (1) Compreender os fundamentos físicos e geométricos da difração de raios X;
- (2) Capacitar o aluno na identificação e caracterização estrutural de materiais cristalinos;
- (3) Aplicar métodos de análise qualitativa e quantitativa de fases.
- (4) Introduzir o refinamento estrutural (monocristais) e o método de Rietveld (policristais).

Bibliografia

1. Giacovazzo, C. (Ed.). *Fundamentals of Crystallography*, 2nd ed. IUCr Texts on Crystallography 7. Oxford: IUCr/Oxford University Press, 2002.
2. Burns, G.; Glazer, A. M. *Space Groups for Solid State Scientists*. Academic Press, 1978.
3. Hahn, T. (Ed.). *International Tables for Crystallography, Vol. A: Space-Group Symmetry*. Kluwer Academic Publishers, 2006.
4. Hammond, C. *The Basics of Crystallography and Diffraction*. Oxford University Press, 2000.
5. Young, R. A. (Ed.). *The Rietveld Method*. IUCr Texts on Crystallography 7. Oxford: IUCr/Oxford University Press, 1995.
6. Cullity, B. D.; Stock, S. R. *Elements of X-Ray Diffraction*. Prentice Hall, 2001.
7. Kittel, C. *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 2004.
8. Ladd, M. F. C.; Palmer, R. A. *Structure Determination by X-ray Crystallography*. Springer, 2013.