

Código: QI853								
Nome: Introdução à Cristalografia								
Nome em Inglês: Introduction to Crystallography								
Nome em Espanhol: Introducción a la Cristalografía								
Tipo de Disciplina: Semanal								
Tipo de Aprovação: Nota e Frequência								
Característica: Regular								
Frequência: 75%								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: Semestral / Todos os períodos								
Exige Exame: Sim								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
2	-	-	-	-	-	2	15	2
Ocorrência nos Currículos:								
Pré-requisitos: QI145 ou QI146								
Ementa: Cristais e estruturas cristalinas. Retículos cristalinos e simetria espacial. Sistemas cristalinos. Difração em cristais: raios X, nêutrons e elétrons. Introdução à determinação de estrutura cristalina. Exemplos de minerais, compostos iônicos e moleculares.								
Programa:								
<ul style="list-style-type: none"> - Retículos cristalinos e o experimento de difração; espaço recíproco e fatores de estrutura. - Simetria cristalina; simetria envolvendo a translação; sistemas cristalinos e grupos espaciais. - Métodos experimentais: processos e métodos de cristalização; coleta de dados para monocristais e amostras policristalinas. Difração de raios X, nêutrons e elétrons. - Solução e refinamento de estruturas; métodos de Patterson e diretos; método dos mínimos quadrados. Desordem. Dispersão anômala. - Bancos de dados cristalográficos. 								
Bibliografia Básica								
1) HAMMOND, C. The basics of crystallography and diffraction . 3rd ed. Oxford, N.Y.: Oxford University Press, 2009. 432p.								
2) MASSA, W. Crystal structure determination . 2nd ed. Berlin: Springer, 2004. 210p.								
3) CLEGG, W. Crystal structure determination . Oxford: Oxford University Press, 1998. 84p.								
Bibliografia Complementar								
1) CLEGG, W. (Ed.). Crystal structure analysis: principles and practice . 2nd ed. Oxford, N.Y.: Oxford University Press, 2009. 387p								
2) GLUSKER, J. P. Crystal structure analysis for chemists and biologists . New York, N.Y.: VCH, 1994. 854p.								
3) PECHARSKY, V. K. Fundamentals of powder diffraction and structural characterization of materials . 2nd ed. New York: Springer, 2009. 741p.								
4) LADD, M. F. C. Structure determination by X-ray crystallography . 4th ed. New York, NY: Kluwer/Plenum, 2003. 819p.								
5) RISSANEN, K. Advanced X-Ray Crystallography . Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2012. (Topics in Current Chemistry; 315). E-book.								

