



Governo do Estado do Rio de Janeiro  
Secretaria de Estado de Ciência e Tecnologia  
Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro  
SECRETARIA ACADÊMICA/REITORIA

## PROGRAMA ANALÍTICO DE DISCIPLINA

Disciplina: PCN1739 - Cristalografia e Difração de Raios X

CCT/LCFIS - Laboratório de Ciências Físicas

Início: 2022/2

Pré-requisito(s): não tem

Co-requisito(s): não tem

Equivalência(s): não tem

Carga horária: 68 (34 teóricas , 34 práticas, 0 extraclasse)

Créditos: 3

Tipo de aprovação: Média/Frequência

### EMENTA

Aspectos teóricos:

Princípios de cristalografia; Propriedades dos Raios X; Aplicações da difração de Raios X; Métodos experimentais; Introdução ao Refinamento Rietveld; Tamanho de cristalito: métodos de Scherrer e Williamson-Hall.

Aspectos experimentais:

Técnicas de preparação de amostras policristalinas para difração de Raios X; Medidas experimentais por difração de Raios X; Banco de dados e a identificação de compostos cristalinos; Apresentação de programas para análises de dados; Análise de dados de difração de Raios X.

### CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

Aulas teóricas

1. Introdução a cristalografia. (2h)
2. Estrutura Cristalina, rede de Bravais e simetrias de Cristais. (4h)
3. Produção, Propriedades e Detecção dos Raios-X. (4h)
4. Difração de Raios-X. (4h)
5. Fator de espalhamento atômico. (2h)
6. Largura dos picos de difração. (2h)
7. Métodos Experimentais de Difração de Raios-X. (6h)
8. Caracterização de Materiais por Difração de Raios-X. (4h)
9. Métodos de refinamento Rietveld de estruturas cristalinas. (6h)

Aulas experimentais

10. Preparação de amostras policristalinas para DRX. (6h)
11. Medidas experimentais de difração de Raios X. (6h)
12. Banco de dados e a identificação de compostos cristalinos. (4h)
13. Análise de dados de difração de Raios X - FullProf. (6h)
14. Análise de dados de difração de Raios X - PcrystalX-Web. (6h)
15. Utilização dos métodos de Scherrer e Williamson-Hall. (6h)

### BIBLIOGRAFIA

1. B.D. Cullity, S.R. Stock, Elements of X-Ray Diffraction-Pearson Education Limited, 2014
2. H.P. Klug e L.E. Alexander, X-Ray diffraction procedures for polycrystalline and amorphous materials, John Wiley & Sons, 1974.
3. Georg Will, Powder Diffraction: The Rietveld Method and the Two Stage Method



Governo do Estado do Rio de Janeiro  
Secretaria de Estado de Ciência e Tecnologia  
Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro  
SECRETARIA ACADÊMICA/REITORIA

4. Michael M. Woolfson, An introduction to X-ray crystallography-CUP (1997).
5. R E Dinnebier, S J L Billinge, Powder Diffraction: Theory and Practice - Royal Society of Chemistry (2008).
6. Yoshio Waseda, Eiichiro Matsubara, Kozo Shinoda. X-Ray Diffraction Crystallography, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2011).
7. Vitalij K. Pecharsky, Peter Y. Zavalij - Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials-Springer US (2009)