

1º Ciclo de Minicursos de Cristalografia

Determinação de Estrutura com dados DRX por pó.

Data: 4 a 8 de julho de 2016.

Local: IQSC-USP. São Carlos-SP.

Público alvo: Alunos de programas de pós-graduação, professores universitários, colaboradores de indústria.

Carga horária: O curso será realizado em 4 dias (32 horas), sendo que 12 horas serão dedicadas à teoria básica sobre difração de raios X e cristalografia.

Informações Gerais: A Bruker-Brasil irá fornecer licenças temporárias do Topas para os participantes. As licenças irão valer apenas para os dias de aula, e no local das aulas. Quem tem o Topas ou o Topas-Academic poderá vir com ele.

Instrutores e palestrantes:

Universidade Federal de Juiz de Fora.
Alexandre Cuin (AC)

Instituto de Química - Unesp. Araraquara-SP.
Carlos O. Paiva Santos (COPS), Diego Luis Tita (DLT), Jorge
Manuel Vieira Capela (JMVC), Julia Sawaki Tanaka (JST), Marisa
Veiga Capela (MVC), Selma Gutierrez Antonio (SGA).

Análises estatísticas: MVC

Método de mínimos-quadrados: JST

Modelos cinéticos: JMVC

Método de Rietveld: COPS, DLT, SGA

Determinação de estruturas cristalinas: AC, COPS, SGA

1º dia, 1ª hora: Abertura. Apresentação dos instrutores e da filosofia do curso.

1º dia. Teoria

8:00: Abertura. Apresentação dos instrutores e da filosofia do curso.

9:00: Elementos de simetria e grupos espaciais. Interpretação do símbolo do grupo espacial.

10:00: Intervalo

10:20: Fator de estrutura e o problema das fases. Multiplicidade de um sítio e fator de ocupação. Equação da intensidade dos pontos de um difratograma de pó.

11:00: O método de mínimos-quadrados.

12:00 - 13:45: Almoço

14:00: Análises estatísticas.

15:00: Método Direto e *simulated annealing*.

15:45: Intervalo

16:00: Corpos rígidos e a matriz Z.

16:30: Mapas de Fourier e Fourier diferença.

17:00: Apresentação da Bruker-Brasil pelo Engenheiro João Fiori.

Tutoriais (T) e seminários (S)

T: JEdit e Topas

T: Indexação de um padrão de difração de policristais.

- S/T: Métodos de Le Bail e de Pawley para decomposição do padrão e refinamento de cela unitária.
- S: Função de perfil. Alargamento instrumental, tamanho de cristalito e microdeformação.
- T: Determinação de estrutura pelo método de *charge flipping*.
- S: Método de Rietveld
- T: Criando uma matriz Z através do editor de corpo rígido do Topas.
- T: Determinação de estruturas pelo método de *simulated annealing*.
- T: Testando um modelo de estrutura cristalina através de refinamentos pelo método de Rietveld.
- T: Cálculo de distância e ângulos.
- T: Gerando um arquivo CIF.
- T: Programas auxiliares: Edição de um CIF para publicação. Visualização de estruturas cristalinas.
- T: Outros programas para determinação de estruturas cristalinas.