



## **PLANO DE ENSINO – 2022/2**

### **I. IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA**

<b>Código</b>	<b>Nome da disciplina</b>	<b>Créditos</b>	<b>Período</b>
EMC510018	Cristalografia e Difratometria de Raios-X	3	2

### **II. PROFESSOR MINISTRANTE**

Prof Dr. Claudio Michel Poffo

### **III. TUTOR**

Não tem

### **IV. CURSO E PÚBLICO-ALVO**

**Curso:** Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais

**Público alvo:** Estudantes dos Cursos de Engenharia, especialmente Engenharia de Materiais e Engenharia Química.

### **V. EMENTA**

Introdução à geração de raios-X e suas utilidades. Descrição de um cristal e suas redes (Bravais). Indexação de índices e planos (Miller). Caracterização de um difratograma de raios-X. Fator de estrutura das fases. Exemplos práticos de materiais cristalinos, semi-cristalinos, nanocristalinos e amorfos.

### **VI. OBJETIVOS**

- Introduzir conceitos relacionados à caracterização de materiais via DRX, abordando à relação estrutura/propriedades/caracterização.
- Apresentar ao acadêmico definições sobre conceitos básicos envolvendo DRX e suas aplicações a Ciência e Engenharia de Materiais.
- Propiciar o entendimento das variáveis experimentais associadas a técnica de DRX e principais resultados estruturais possíveis de serem obtidos.
- Estudo do Método de Rietveld para refinamento de parâmetros estruturais de materiais cristalinos.
- Realizar treinamento com software (General Structure Analysis System – GSAS) baseado no Método de Rietveld.

### **VII. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO**

Introdução a geração de raios-X, princípios básicos de funcionamento de um difratômetro de raios-X, preparação de amostras para DRX, Descrição de um cristal e suas redes (Bravais), Caracterização de um difratograma de raios-X, exemplos práticos de difratogramas referentes a materiais cristalinos, nanocristalinos e amorfos. O Método de Rietveld. Aplicações práticas do Método de Rietveld.

### **VIII. METODOLOGIA DE ENSINO / FORMA DE TRABALHO**

- As aulas virtuais serão realizadas no formato presencial.
- A combinar poderão ser realizadas aulas virtuais realizadas na Plataforma Moodle, via ferramenta



BigBlueButtonBN, cujo link estará disponível na página principal da disciplina no Moodle.

- As avaliações serão realizadas de forma presencial na sala B6 Bloco B – Engenharia Mecânica.
- O registro de frequência será realizado com base na participação do aluno nas aulas.
- Materiais de apoio serão disponibilizadas através do MOODLE.
- O atendimento individual para sanar dúvidas ocorrerá nas datas, horários e formas descritas no MOODLE.

## IX. METODOLOGIA DE AVALIAÇÃO

Ao longo do trimestre serão realizadas três avaliações. Prova = P, Trabalho = T e Prova Oral = PO.

A nota final será composta pela média ponderada das avaliações, conforme descrito abaixo:

$$NF = 0,4*NP + 0,4*NT + 0,2*NPO$$

Conforme artigo 43 do regimento do regimento PGMAT (<https://ppgmat.paginas.ufsc.br/files/2016/06/Regimento-PGMAT.pdf>) o aluno será considerado aprovado se obtiver  $NF \geq 7,0$  (sete) e frequência de 75% (setenta e cinco por cento) da carga horária da disciplina (artigo 42).

## X. CRONOGRAMA

- (06/06) 1<sup>a</sup> semana: Apresentação do plano de ensino, Introdução a geração de Raios X.  
(13/06) 2<sup>a</sup> semana: Princípios básicos de funcionamento de um difratômetro de raios-X, preparação de amostras para DRX.  
(20/06) 3<sup>a</sup> semana: Descrição de um cristal e suas redes (Bravais), Indexação de estruturas cristalinas.  
(27/06) 4<sup>a</sup> semana: Exemplos práticos de difratogramas referentes a materiais cristalinos, nanocristalinos e amorfos.  
(04/07) 5<sup>a</sup> semana: Determinação de parâmetros de rede através de relações cristalográficas. O Método de Rietveld.  
(11/07) 6<sup>a</sup> semana: Busca de estruturais cristalográficas em banco de dados ICSD - Inorganic Crystal Structure Database.  
(18/07) 7<sup>a</sup> semana: Prova 1.  
(25/07) 8<sup>a</sup> semana: Método de Rietveld. Demonstração do software GSAS.  
(01/08) 9<sup>a</sup> semana: Demonstração GSAS.  
(08/08) 10<sup>a</sup> semana: Treinamento GSAS.  
(15/08) 11<sup>a</sup> semana: Treinamento GSAS.  
(22/08) 12<sup>a</sup> semana: Treinamento GSAS.  
(29/08) 13<sup>a</sup> semana: Treinamento GSAS.  
(05/08) 14<sup>a</sup> semana: Prova oral e entrega do trabalho prático.

## XI. BIBLIOGRAFIA

1. Kittel, C. "Introdução à Física do Estado Sólido"
2. Jenkins, R. Snyder, R.L. "Introduction to X-ray Powder Diffractometry"
3. Cullity, B.D. "Elements of X-ray diffraction"
4. Young, R.A. "Rietveld Method"
5. Materiais disponíveis no moodle.