



TEQ XI - Métodos de Resolução de Estruturas de Pequenas Moléculas por Difração de Raios X em Monocristais

Código: PQ515	Pré-requisitos: Co-requisito:
Horas Aulas/Semana: PRÁTICA: 00 TEÓRICA: 04	
Créditos: 04	Responsáveis: Silvana Guilardi.
Objetivos: Apresentar os fundamentos físicos e matemáticos necessários à determinação de estruturas de pequenas moléculas por difração de raios X em monocristais. Treinar o estudante nas técnicas de refinamento e tratamento dos dados cristalográficos.	
Ementa: <ul style="list-style-type: none">- Coleta de Dados de Intensidade dos Feixes de Raios X Difractados.- Redução de Dados.- A Síntese de Fourier e o Problema da Fase.- Resolução da Estrutura: métodos para solução do problema da fase (Função de Patterson e o Método do Átomo Pesado e Métodos Diretos).- Complementação e Refinamento da Estrutura.- Cálculos de Propriedades Moleculares.- Aplicações.	
Bibliografia: <ol style="list-style-type: none">1. GIACOVAZZO, C.; MONACO, H. L.; VITERBO, M.D.; SCORDARI, F.; GILLI, G.; ZANOTTI, G. & CATTI, M. <i>Fundamentals of Crystallography</i>. Edited by C. Giacovazzo, Oxford University Press, New York, 1992.2. GIACOVAZZO C. <i>Direct Methods in Crystallography</i>, Academic Press Inc., London, 1980.3. STOUT, G.H., Jensen, H. <i>X-ray Structure Determination: A practical guide</i>. The Macmillan Company, New York, 1986.4. WOLFSON, M. M. <i>An Introduction to X-ray Crystallography</i>. 2a ed., Cambridge University Press, New York, 1997.	