

Título em Português: A cristalografia no dia a dia

Título em Inglês: crystallography in everyday life

Autor: Lucas Vidal Costa Militão

Instituição: Universidade de São Paulo

Unidade: Instituto de Física de São Carlos

Orientador: Javier Alcides Ellena

Área de Pesquisa / SubÁrea: Física Geral

Agência Financiadora: USP - Programa Unificado de Bolsas

Cristalografia no dia a dia

Lucas Vidal Costa Militão

Javier Alcides Ellena

IFSC/USP

lucas.milito@usp.br

Objetivos

Neste projeto serão apresentadas diferentes facetas da cristalografia as quais são amplamente observáveis. Primeiramente, a cristalografia estrutural, estudada no Laboratório Multiusuário de Cristalografia Estrutural (LaMuCrEs), do qual faço parte, possui uma ampla utilidade prática. Desde a dureza de lâminas metálicas até a biodisponibilidade de fármacos, a estrutura cristalina interfere em diversas propriedades do material em questão. Nesse sentido, é impossível abordar a Física do estado sólido sem mencionar estruturas cristalinas. No laboratório, para identificar essas estruturas são utilizados difratômetros de raio x. Esses equipamentos geram raio x e analisam os padrões de difração que as estruturas cristalinas geram. Desse modo é possível determinar a cela unitária(1) de um cristal e suas características estruturais correspondentes. Com a obtenção de informação estrutural de um material sólido por meio de operações de simetria é possível remontar o cristal inteiro a partir da sua unidade assimétrica, seu grupo espacial e seus parâmetros de cela. Neste relatório será mostrado um exemplo de análise de espectro criado para o aprendizado das técnicas de tratamento de espectro.

Métodos e Procedimentos

No projeto serão apresentados conhecimentos resumidos sobre a presença de estruturas cristalinas e estudos cristalográficos na vida diária da maioria das pessoas. Também serão apresentados exemplos de resultados obtidos por meio de técnicas de Difração de Raio X e espectroscopia Raman (técnicas estudadas durante o período da Iniciação científica). O *LabRAM HR Evolution Raman spectrometer* com uma grade de difração de 1800 ranhuras por milímetro foi usado para a coleta de dados do exemplo.

Resultados

No projeto da análise do espectro da Paroxetina, foram obtidos e categorizados os grupos funcionais. Também houve a comparação com a literatura, e foi concluído que o material analisado era de alta qualidade. Na figura um é analisada a área do *fingerprint* (Área no qual os grupos funcionais se expressam) da molécula.

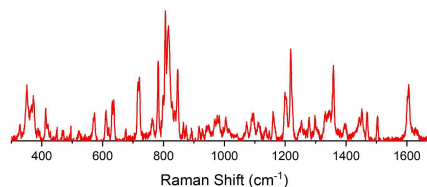


Figura 1: Espectro Raman até 1600 cm⁻¹

Conclusões

O objetivo do aprendizado de tratamento de dados da espectroscopia Raman foi concluído com sucesso. O espectro tratado tinha semelhança suficiente com a literatura e foi possível o aprendizado de diferentes técnicas para tratamento de dados, como remoção da *baseline*, identificação de picos, deconvolução de picos, etc.

Referências Bibliográficas

1. Hoffmann, Frank. "1.7 The Concept of the Unit Cell." Introduction to Crystallography.

Crystallography in day-to-day life

Lucas Vidal Costa Militão

Javier Alcides Ellena

IFSC/USP

lucas.milito@usp.br

Objectives

In this project different facets of crystallography will be presented which are widely observable. First, Structural Crystallography, studied in the Multiuser Estrutural Crystallography Laboratory (LaMuCrEs), which I am a member of, possesses great practical utility. From metal sheet hardness to drug bioavailability, the crystalline structure interferes in various properties of the analyzed material. That way, it is impossible to approach solid state Physics without mentioning crystalline structures. In the lab, to identify those structures, X-ray diffractometers are used. Those equipment generate X-ray and analyze the subsequent diffraction patterns generated by the different crystalline structures. That way, it is possible to determine the unitary cell₍₁₎ of a crystal and its corresponding structural characteristics. Obtaining structural information of a solid, it is possible to reassemble the entire crystal through symmetry operations with its asymmetric unit, its space group and cell parameters. In this report an example of spectrum analysis, created for learning how to perform spectrum treatment techniques will be shown.

Materials and Methods

The project will present summarized knowledge about the presence of crystalline structures and crystallographic studies in the daily lives of most people. Examples of results obtained by means of X-Ray Diffraction and Raman

spectroscopy (techniques studied during the period of Scientific Initiation) will also be presented. The *LabRAM HR Evolution Raman spectrometer* with a 1800 grooves per millimeter diffraction grating was used for the exemplified measurement.

Results

In the Paroxetine spectrum analysis project, functional groups were obtained and categorized. There was also a comparison with the literature, and it was concluded that the material analyzed was of high quality. In figure one, the fingerprint area (Area in which the functional groups are expressed) of the molecule is analyzed.

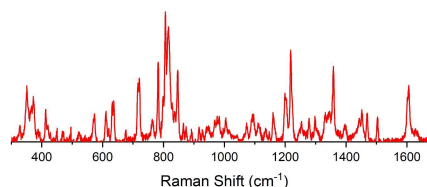


Figure 1: Raman spectrum up to 1600 cm⁻¹

Conclusions

The learning objective of Raman spectroscopy data handling was successfully completed. The treated spectrum had enough similarity with the literature and it was possible to learn different techniques for data treatment, such as baseline removal, peak identification, peak deconvolution, etc.

References

1. Hoffmann, Frank. "1.7 The Concept of the Unit Cell." Introduction to Crystallography.