



PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA

2º Semestre - 2019

Disciplina	
Código	Nome
QI853	Introdução à Cristalografia

Turmas	Horário	Local
A	Quinta-feira 21/23 h	IQ17

Docentes
Juan Carlos Tenorio. E-mai: juandetenorio@yahoo.com. Local para contato: Bloco I, Lab: I102.

Critérios de Avaliação e Aprovação
<p>1- Prova final escrita Será realizada uma prova escrita presencial final Pf. A prova terá um peso de 65% do total da nota.</p> <p>2- Seminários Realização de seminários por grupos de no máximo 4 integrantes. Os seminários correspondem à apresentação de um trabalho de pesquisa sobre uma molécula particular indicada pelo professor. Serão fornecidos conjuntos de dados experimentais, onde cada grupo fará um trabalho rotineiro de cristalografia: solução, refinamento estrutural e discussão sobre os aspectos cristalóquímicos de cada uma das estruturas. Cada seminário deverá ser de no máximo 20 minutos de arguição com 10 minutos de perguntas. O seminário corresponde ao 35% do total da nota</p> <p>A nota final NF do curso será estabelecida: <math>NF = (Pf \cdot 0.65 + N(\text{seminário}) \cdot 0.35)</math></p> <p>Será considerado <b>Aprovado</b> o aluno que tiver NF maior ou igual a 5,0.</p> <p>*Se a NF for menor de 5 será considerado para Exame. *Se a nota da Pf for menor que 3,0. Será considerado para Exame. Em ambos casos a NF do curso será a do Exame.</p>

Calendário
01/07 (Não haverá aula)
08/07 (Semana da Química)
17/10 (Optativo semana da iniciação científica)
21/11 e 28/11 (Seminários)
5/12 (Prova final)
12/12 (Exame)

**Outras informações relevantes**

Não haverá prova substitutiva, a não ser por casos considerados dentro do regimento acadêmico.

Havendo a disponibilidade do equipamento de difração de raios X em monocristais instalado no Instituto de Química, e caso haja a aprovação do professor responsável pelo equipamento, será contemplada uma visita no Lab. de difração de raios X, para a realização de um experimento, que será realizado pelo professor ministrante do curso.

Durante algumas aulas serão realizados tutoriais dos softwares mais utilizados para a construção e interpretação dos dados e dos modelos estruturais. Será necessário o uso de laptops individuais.

SEGUEM A EMENTA, PROGRAMA E BIBLIOGRAFIA



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
INSTITUTO DE QUÍMICA



PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS

2º semestre de 2019

Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QI853	Introdução à Cristalografia

<b>Vetor</b> OF:S-5 T:002 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:002 SL:002 C:002 AV:N EX:S FM:75%
---

<b>Pré-Req</b>   QI145
------------------------

<b>Docente</b>   Juan Carlos Tenorio Clavijo
--

<b>Ementa</b> Cristais e estruturas cristalinas. Retículos cristalinos e simetria espacial. Sistemas cristalinos. Difração em cristais: raios X, nêutrons e elétrons. Introdução à determinação de estrutura cristalina. Exemplos de minerais, compostos iônicos e moleculares.
--

<b>Programa</b> - Retículos cristalinos e o experimento de difração; espaço recíproco e fatores de estrutura. - Simetria cristalina; simetria envolvendo a translação; sistemas cristalinos e grupos espaciais. - Métodos experimentais: processos e métodos de cristalização; coleta de dados para monocristais e amostras policristalinas. Difração de raios X, nêutrons e elétrons. - Solução e refinamento de estruturas; métodos de Patterson e diretos; método dos mínimos quadrados. Desordem. Dispersão anômala. - Bancos de dados cristalográficos.
---

<b>Bibliografia</b> <b>Básica</b> 1) Hammond, C. The basics of crystallography and diffraction. 3rd ed. Oxford, N.Y. : Oxford University Press, 2009. 2) Massa, W. Crystal structure determination. 2nd ed. Berlin : Springer, 2004. 3) Clegg, W. Crystal structure determination. Oxford : Oxford University Press, 1998. 4) Giacovazzo, C. Fundamentals of crystallography. 2 <sup>nd</sup> ed. Oxford: Oxford Univ. Press, 2002 5) Woofson. An Introduction to X-ray Crystallography. 2 <sup>nd</sup> ed. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1997. <b>Complementar</b> International Tables for Crystallography. Dordrecht ; London :Published for the International Union of Crystallography by Kluwer Academic Publishers
---

**Critérios de Avaliação**

Critérios de avaliação definidos pelo Professor, com base no disposto na Seção I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliação do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduação. Frequência: 75 % (\* O abono de faltas será considerado dentro do previsto no capítulo VI, seção X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduação)