



**PLANO DE DESENVOLVIMENTO DE DISCIPLINA**

2º Semestre 2025

Disciplina	
Código	Nome
QI853	Introdução à Cristalografia

Turmas	Horário	Local
A	Sexta-feira das 10 h às 12 h	LIFE

**Docentes**

Wdeson Pereira Barros. wdeson@unicamp.br. Local para contato: Bloco D, sala D-246.

**Forma de Condução/Organização da Disciplina e das Avaliações**

A disciplina será conduzida de forma presencial. Serão abordados temas teóricos e práticos relacionados à resolução e refinamento de estruturas moleculares. Para a parte prática, será abordado o uso de softwares específicos para tratamento de dados cristalográficos. O uso de um notebook para acompanhar a parte prática relacionada ao tratamento de dados em sala de aula será importante para acompanhar a dinâmica das aulas. As avaliações constituirão na participação e frequência em sala de aula, resolução de testes e análise de dados cristalográficos obtidos experimentalmente. Além da bibliografia indicada, materiais complementares serão disponibilizados na plataforma Moodle. A plataforma Moodle também poderá ser utilizada para a comunicação de dúvidas e esclarecimentos.

**Prazos de Entrega das Atividades e dos Resultados das Avaliações**

Serão disponibilizados testes para os alunos na plataforma Moodle, que terão uma semana para entregar a resolução em arquivo eletrônico na mesma plataforma em formato PDF. Além dos testes, serão realizadas atividades práticas a partir de dados cristalográficos disponibilizados também na plataforma Moodle. Estas atividades consistem em processar os dados utilizando os softwares indicados, e os resultados deverão ser devolvidos na forma de imagem das estruturas moleculares e um arquivo com as informações da estrutura, com formato que será definido em sala de aula.

**Critérios de Avaliação e Aprovação**

O critério de avaliação será individual e a média final será definida como:

$$M_F = (4M_T + 6M_P)/10$$

onde  $M_F$  = média final da disciplina;

$M_T$  = média aritmética das notas dos testes;

$M_P$  = média aritmética das notas das atividades práticas.

Se  $M_F \geq 5,0$ : o aluno será **Aprovado**.

Se  $M_F < 5,0$ : o aluno fará o **Exame**.

Em caso de exame, a nota final da disciplina ( $N_F$ ) será:

$$N_F = (M_F + N_E) / 2$$

onde  $N_E$  = nota no Exame. Nesse caso:

Se  $N_F \geq 5,0$ : o aluno será **Aprovado**;

Se  $N_F < 5,0$ : o aluno será **Reprovado**.

Média parcial mínima que permite ao aluno realizar o Exame: **2,5**. Se  $M_F < 2,5$  o aluno será reprovado sem direito a realizar o Exame (Art 57 Inciso II – Regimento da Graduação).

Art 57 - §2º Para a realização do exame final o aluno deverá obter a frequência mínima estabelecida para a disciplina e atender as disposições dos incisos I e II do art. 57.

O exame final substituirá a avaliação no dia de faltas abonadas pelo inciso V do Art 72 do Regimento da Graduação.

#### Forma de Atendimento Extra-Classe

Descrição: O discente deve agendar o atendimento extraclasse diretamente com o docente.

Calendário	
Data	Atividade
Data	Atividade
08/08/2025	Apresentação da disciplina / discussão de conteúdo
15/08/2025	Apresentação / discussão de conteúdo / Teste 1
22/08/2025	Semana da Química - Não haverá aula
29/08/2025	Apresentação / discussão de conteúdo
05/09/2025	Apresentação / discussão de conteúdo / Teste 2
12/09/2025	Apresentação / discussão de conteúdo
19/09/2025	Apresentação / discussão de conteúdo / Teste 3
26/09/2025	Apresentação / discussão de conteúdo
03/10/2025	Apresentação / discussão de conteúdo / Teste 4
10/10/2025	Apresentação / discussão de conteúdo
17/10/2025	Apresentação / discussão de conteúdo / Teste 5
24/10/2025	Apresentação / discussão de conteúdo
31/10/2025	Apresentação / discussão de conteúdo
07/11/2025	Apresentação / discussão de conteúdo / P1
14/11/2025	Apresentação / discussão de conteúdo / P2
21/11/2025	Feriado - Não haverá aula
05/12/2025	Semana de estudos
12/12/2025	Exame
<i>Art. 58 do Regimento Geral de Graduação: O Exame deverá ser realizado no período previsto pelo Calendário Escolar e deverá estar agendado para o mesmo dia da semana e horário em que são ministradas as aulas da disciplina, exceto na ocorrência de feriado ou ponto facultativo.</i>	
18 a 22/08 - Semana da Química - não haverá aula para as disciplinas dos cursos 05/50.	
15/10 - Avaliação e discussão de cursos - Não haverá aula	
27 e 28/10 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades	
15/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades	
20 a 22/11 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades	
01 a 06/12 - Semana de Estudos	
08/12 - Feriado/Expediente Suspenso - Não haverá atividades	
09 a 15/12 - Semana de Exames	

#### Outras informações relevantes

(1) Art. 56 do Regimento Geral de Graduação: São condições para aprovação: II - nas disciplinas em que nota e frequência são adotadas como forma de avaliação – obter **nota final** igual ou superior a 5,0 (cinco vírgula zero) e a frequência mínima estabelecida para a disciplina no Catálogo dos Cursos de Graduação; a frequência mínima de 75%.

(2) **Sobre o Abono de Faltas:** os critérios do Abono de Faltas são definidos pelo artigo 72, do Regimento Geral de Graduação.

(3) Quaisquer alterações no PDE, propostas pelo(a) Docente ou Discentes, no transcorrer do semestre, só poderão ser realizadas mediante a concordância do(a) Docente e Discentes, e autorização da Comissão de Graduação.

(4) Para casos particulares não contemplados nestas instruções, os estudantes devem entrar em contato com o professor preferencialmente por e-mail ou pela plataforma *Moodle*. Os estudantes podem procurar também o docente presencialmente.

(5) As informações serão enviadas através do *Moodle*. Cabe ao aluno manter seus e-mails atualizados para garantir o recebimento das correspondências. Portanto, os alunos devem acessar suas contas de e-mail institucional (e-mail DAC, unicamp.br) ou colocar o redirecionamento para alguma conta pessoal de e-mail.

(6) **INSTRUÇÃO NORMATIVA CCG Nº 02/2025 Cláusula de Honestidade e Lisura Acadêmica:**

Todas as atividades relacionadas às disciplinas devem ser realizadas em conformidade com as orientações fornecidas pelos docentes e com o devido rigor ético.

Caso o(a) docente responsável, no exercício de sua liberdade de cátedra, forme convicção acerca da ausência de lisura ou de condições adequadas para a realização da atividade avaliativa, poderá atribuir nota zero, seja para a atividade única ou, conforme o caso, para o conjunto de atividades do semestre. A ocorrência deverá ser fundamentada e comunicada à Coordenação de Curso de Graduação, podendo o(a) estudante estar sujeito a processo administrativo.

SEGUEM A EMENTA, O PROGRAMA E A BIBLIOGRAFIA



### Disciplina Eletiva

Código	Nome
QI853	Introdução à Cristalografia

#### Vetor

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%

**DISCIPLINA SERÁ MINISTRADA COM A PÓS-GRADUAÇÃO (QP648)**

Pré-Req QI145 ou QI146

Docente Wdeson Pereira Barros

#### Ementa

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.

#### Programa

- 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.

#### Bibliografia

##### Bibliografia Básica

- 1) Hammond, C. The basics of crystallography and diffraction. 3rd ed. Oxford, N.Y.: Oxford University Press, 2009. 432p.
- 2) Massa, W. Crystal structure determination. 2nd ed. Berlin: Springer, 2004. 210p.
- 3) Clegg, W. Crystal structure determination. Oxford: Oxford University Press, 1998. 84p.

##### Bibliografia Complementar / Avançada

- 1) Clegg, W. (Ed.). Crystal structure analysis: principles and practice. 2nd ed. Oxford, N.Y.: Oxford University Press, 2009. 387p
- 2) Glusker, J. P. Crystal structure analysis for chemists and biologists. New York, N.Y.: VCH, 1994. 854p.
- 3) Pecharsky, V. K. Fundamentals of powder diffraction and structural characterization of materials. 2nd ed. New York: Springer, 2009. 741p.
- 4) Ladd, M. F. C. Structure determination by X-ray crystallography. 4th ed. New York, NY: Kluwer/Plenum, 2003. 819p.
- 5) Rissanen, K. Advanced X-Ray Crystallography. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2012. (Topics in Current Chemistry; 315). E-book.
- 6) Artigos selecionados pelo docente.

#### Crerios de Avaliao

Crerios de avaliao definidos pelo Professor, com base no disposto na Seao I - Normas Gerais, Capitulo V - Da Avaliao do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduao. Frequencia: 75 % (\* O abono de faltas ser considerado dentro do previsto no capitulo VI, seao X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduao)