



Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QF933	Captura de Energia Ambiental: Fenômenos, Mecanismos, Materiais e Resultados.

Vetor

OF:S-6 T:002 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:002 SL:002 C:002 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req

Nenhum, mas a maior parte das leituras obrigatórias está publicada em inglês.

Docente

Fernando Galembeck

Ementa

Energia no ambiente. Possibilidades e limites termodinâmicos. Eletricidade no meio ambiente. Sistemas desenvolvidos: fotovoltaicos, fototérmicos e eólicos. Novos candidatos: geradores osmóticos e de ondas, piezoeletricidade, termoeletricidade, higroeletricidade, elasto-eletricidade. Geração em grande e pequena escalas, geração distribuída e a digitalização da sociedade.

Programa

As formas de energia ambiental e os limites termodinâmicos. Aspectos históricos. Processos implementados em grande escala. Novos candidatos e suas perspectivas. Microgeração. Captura de energia ambiental, a Internet das Coisas, a indústria 4.0 e a digitalização da sociedade.

Bibliografia

F. Galembeck e T. A. L. Burgo, Chemical Electrostatics, Springer, Cham, 2017.
Rein André Roos, The Forgotten Pollution, Kluwer, Dordrecht 1996.
Reccab Manyala (editor), Energy Harvesting, Intech Open, London, 2018

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 sero considerado dentro do previsto no capitulo VI, seao X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduao)



Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QF934	Determinação de potencial zeta em sistemas nanoestruturados

Vetor
OF:S-6 T:002 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:002 SL:002 C:002 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req	QF531
---------	-------

Docente	Francisco Benedito Teixeira Pessine
---------	-------------------------------------

Ementa
Introdução. Teoria do equilíbrio eletrocinético da dupla camada elétrica (DCE). Relações de reciprocidade. Superfície de cisalhamento. Medidas das propriedades eletrocinéticas. Limitações da teoria. Modelo padrão da DCE. Dinâmica na DCE. Efeitos eletrocinéticos. Soluções numéricas das equações relativas aos efeitos eletrocinéticos. Efeitos eletrocinéticos em campos alternados. Validade das equações eletrocinéticas.

Programa
<ol style="list-style-type: none">1. Introdução.2. Teoria do equilíbrio eletrocinético da dupla camada elétrica (DCE). Eletro-osmose. Potencial "streaming". Eletroforese (eq. de Smoluchowski e Huckel). Fórmula de Henry.3. Relações de reciprocidade.4. Superfície de cisalhamento.5. Medidas das propriedades eletrocinéticas. Medidas do potencial e da corrente "streaming". Eletroforese.6. Limitações da teoria.7. Modelo padrão da DCE. Equações relacionadas à eletrocinética. Condições de contorno.8. Dinâmica na DCE. Desenvolvimento da DCE em um condutor. DCE devida a íons em uma superfície dielétrica. Aplicação a um "problema" coloidal. Aproximação de linearização.9. Efeitos eletrocinéticos. Limitações da equação de Smoluchowski. Análise de Dukhin. Solução para uma partícula esférica isolada. Extensão a outros cálculos sobre eletrocinética.10. Soluções numéricas das equações relativas aos efeitos eletrocinéticos.11. Efeitos eletrocinéticos em campos alternados. Comportamento em baixa frequência. Dispersão dielétrica (condutância em alta frequência). Eletroacústica.12. Validade das equações eletrocinéticas

Bibliografia

Foundations of Colloidal Science (R.J. Hunter-Oxford University Press). Artigos da literatura.

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)



Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QF939	Simulações de sistemas dinâmicos: da pandemia ao movimento molecular

Vetor
OF:S-6 T:002 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:002 SL:002 C:002 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req

Docente
Leandro Martínez

Ementa
Nesta disciplina serão abordados conceitos avançados de programação e simulação, visando a implementação de algoritmos de simulação para resolução de equações diferenciais acopladas e simulações atomísticas. É necessário ter algum conhecimento prévio de programação e familiaridade com ambientes computacionais. O curso será baseado na implementação comparativa da cinética de uma evolução de uma epidemia a partir de modelos diferenciais (“macroscópicos”), com modelos de transmissão entre indivíduos (“atomísticos”). A linguagem de programação de escolha é Julia. Detalhes da estrutura do código que será estudada ao longo do curso podem ser vistos em: http://github.com/m3g/CKP .

Programa
<ul style="list-style-type: none">- Solução numérica de equações diferenciais- Estrutura de dados- Listas ligadas- Campos de força / funções de energia potencial- Condições periódicas de contorno- Método das células ligadas para simulações atomísticas- Cinética de reações e parâmetros microscópicos.- Ajustes não-lineares- Otimização local e global de ajustes- Produção de gráficos

Bibliografia
<ul style="list-style-type: none">- Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications - Daan Frenkel , Berend Smit.- The Art of Computer Programming. D. E. Knuth.

Critérios de Avaliação

A avaliação será feita através da entrega de atividades práticas, que receberão nota de 0 a 10. Alunos com nota final maior ou igual a 5 estarão aprovados.

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)



Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QG-092	Geoquímica Orgânica

Vetor
OF:S-6 T:002 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:002 SL:002 C:002 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req	QO-321
----------------	--------

Docente	Paulo Miranda
----------------	---------------

Ementa
A Geoquímica Orgânica complementa um conjunto de áreas como geologia, paleontologia, biologia, engenharia do petróleo, visando a caracterização dos óleos e sedimentos, obtendo dados sobre a origem, rocha de geração, migração e condições dos reservatórios do petróleo, através de estudos dos marcadores biológicos.

Programa
-Visão do petróleo no Brasil e no Mundo -Teorias da origens e composição do petróleo - Sistemas Petrolíferos; Acumulação, da matéria Orgânica e qualidade da MO. -Condições Geológicas para acumulação do Petróleo. -Importantes componentes dos Petróleos. - Denominados marcadores Biológicos. -Análises geoquímicas. Preparação dos solventes Hidrocarbonetos I. -Análises geoquímicas. Preparação dos solventes Hidrocarbonetos II. - Bioderagação. -Maturação. -Parâmetro Geoquimico I. -Parâmetro Geoquimico II. - Fracionamento do Petróleos -Tratamento de Ácidos. -Análises de componentes ácidos.

Bibliografia
1. Tissot, B.P. and Welte, D.H.; "Petroleum Formation and Occurrence" Spring-Verlag, New York, 1984. 2. Annes Mccann Baker et alli, Association of Desk Derrick Clubs, "Fundamentals of Petroleum", third Edition, Mildred Gerding 1986, 3. Kenneth, E. P. ; Moldowan, J. M.; "The Biomarker Guide - Interpreting molecular Fossil in Petroleum and Ancient Sediments ", Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey 07632 (2005).

Crítérios de Avaliação
Crítérios 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)



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA



PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS

Disciplina Eletiva

Código	Nome
QG981	Tópicos Especiais em Ensino de Química I

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%

Pré-Req

AA200

Ementa

Abordagem de temas contemporâneos direta ou indiretamente relacionados ao Ensino de Química, com articulação de conhecimento científico, produções bibliográficas e material instrucional. Especificidades serão descritas por ocasião do oferecimento da disciplina.

Programa

A ser definido por ocasião do oferecimento da disciplina.

Bibliografia

Será fornecida por ocasião do oferecimento da disciplina.

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)



Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QI852	Química dos Elementos

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%

Pré-Req
QI145

Docente
Paulo Cesar de Sousa Filho Sala I209/Lab. I211 – IQ (13053) pcsfilho@unicamp.br

Ementa
Estrutura e propriedades atômicas e suas relações com a química sistemática dos elementos. Processos químicos para a obtenção e aplicações dos elementos e seus compostos. Propriedades físicas e químicas dos compostos de interesse industrial.

Programa
<ul style="list-style-type: none">- Estrutura eletrônica de átomos polieletrônicos e classificação periódica.- Metais e suas propriedades: alcalinos e alcalinos-terrosos; elementos de transição; lantanídeos e actinídeos. Ligas.- Hidrogênio e seus compostos; hidretos dos elementos dos grupos 13 a 17.- Boro e seus compostos; alotropia e clusters.- Grupo do carbono; alotropia, carbetos, nanotubos, fulerenos e grafenos; silício e seus compostos; silicatos e aluminossilicatos.- Grupos do nitrogênio e oxigênio; ativação de nitrogênio e oxigênio, haletos, óxidos e sulfetos. Fósforo, fosfatos e polifosfatos.- Halogênios e gases nobres; pseudohalogênios e inter-halogênios, compostos com oxigênio.- Obtenção dos elementos e seus compostos mais relevantes para a indústria.- Acidez e basicidade dos compostos. Oxiácidos.- Química redox e diagramas de potenciais.

Bibliografia
<p>Básica</p> <ol style="list-style-type: none">1) G. RAYNER-CANHAM e T. OVERTON - "Descriptive Inorganic Chemistry", W.H. Freeman and Company, 2014, 6ª ed.2) N. N. GREENWOOD e A. EARNSHAW - "Chemistry of the Elements", Butterworth-Heinemann, 1997, 2ª ed.3) D. F. SHRIVER, P. W. ATKINS et al. - "Química Inorgânica", Bookman, 2008, 4ª ed.4) J. D. LEE, "Química Inorgânica - não tão concisa" tradução da 5ª ed. inglesa, Ed. Edgard Blücher Ltda, 1999.

Complementar

Textos e artigos selecionados pelo professor.

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)



Disciplina Eletiva

Código	Nome
QI941	Técnicas de caracterização aplicadas a sólidos

Vetor

OF:S-6 T:002 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:002 SL:002 C:002 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req QG101/QG108/QG111

Docente Daniela Zanchet

Ementa

Interação da radiação com a matéria. Técnicas de espalhamento e técnicas espectroscópicas. Microscopias.

Programa

1. Revisão das propriedades eletrônicas e estruturais de sólidos.
2. Interação da radiação e elétrons com a matéria.
3. Fontes de radiação convencionais e luz síncrotron.
4. Técnicas de espalhamento: difração de raios X e espalhamento de raios X a baixos ângulos
5. Técnicas espectroscópicas: informações utilizando diferentes comprimentos de onda (infra-vermelho, ultravioleta-visível e raios X)
6. Caracterização de sólidos com resolução espacial: microscopias eletrônicas.
7. Exemplos práticos de aplicações na caracterização de sólidos e sua importância na indústria.

Bibliografia

A. R. West. Solid State Chemistry and its applications. 2nd ed. Chichester :John Wiley, 2014. 556p.

A ser fornecida pelo professor.

Critérios de Avaliação

Frequência: 75 %

Duas Avaliações . Médias das avaliações > 5.0 (aprovado). < que 5.0 (Exame). Média da nota do Exame com a média das provas . 5 (aprovado). < 5 (reprovado)



Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QI942	Fundamentos de Química Bioinorgânica e Medicinal

Vetor
OF:S-6 T:002 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:002 SL:002 C:002 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req	Química Geral
----------------	---------------

Docente	Pedro Paulo Corbi
----------------	-------------------

Ementa
Fundamentos e definições sobre Química Bioinorgânica e Química Medicinal. Importância de metais essenciais ao organismo humano: aspectos fisiológicos e patológicos. Usos de metais e seus compostos no diagnóstico e no tratamento de doenças. Noções básicas de sistemas de liberação de fármacos.

Programa
<ol style="list-style-type: none">Breve histórico sobre a Química Medicinal e a Química Bioinorgânica.Conceitos fundamentais da Química Bioinorgânica. Elementos essenciais e suas funções no organismo humano.<ol style="list-style-type: none">Os metais e a composição do corpo humano.<ol style="list-style-type: none">Cobre e zinco: cofatores enzimáticos;Ferro em sistemas biológicos;A importância de outros elementos essenciais tais como cálcio, sódio e potássio e de alguns elementos-traço tais como molibdênio e cobalto, dentre outros.Intoxicações por metais pesados: principais fontes de contaminação e a terapia da quelação.O uso de metais e seus compostos em medicina: histórico e atualidades.<ol style="list-style-type: none">O desenvolvimento de complexos de platina no tratamento do câncer: atividades citotóxicas da cisplatina e da carboplatina;Complexos de ouro como anti-inflamatórios: auranofina e outros tiolatos de ouro;A prata e seus compostos como agentes antimicrobianos;Perspectivas de usos de complexos de rutênio, cobre, prata e ouro como fármacos anticâncer.Sistemas de liberação de fármacos: uma introdução.

Bibliografia

1. H.-B. Kraatz, N. Metzler-Nolte (Eds.), Concepts and Models in Bioinorganic Chemistry. Wiley-VCH, Weinheim, 2006.
2. L. Brunton, B. A. Chabner, B. Knollman, Goodman and Gilman's The Pharmacological Basis of Therapeutics, 12th Ed. Mc Graw Hill, New York, 2011.
3. B. K. Keppler, Metal complexes in cancer chemotherapy. Weinheim. VCH Verlagsgesellschaft, 1993.
4. H. Sigel (Ed.) Metal Ions in Biological Systems-biological action of metal ions (v.6). Marcel Dekker, New York, 1976.
5. S. J. Lippard, J. M. Berg. Principles of Bioinorganic Chemistry. Mill Valley: Univ. Science Books, 1994.
6. H. E. Beraldo, A Química Inorgânica na terapia do câncer. Cadernos temáticos de Química Nova na Escola, 6, 13-18, 2005
7. N. Farrell, Biomedical uses and applications of inorganic chemistry. An overview. Coordination Chemistry Reviews, 232, 1-4, 2002.
8. Walter Mertz (Ed.), Trace elements in human and animal nutrition (v. 1 and 2). 5th. ed., Academic Press 1986.
9. D. R. Williams, D. M. Taylor, Trace elements Medicine and Chelation Therapy. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 1995.
10. V. L. Almeida, A. Leitão, L. C. B. Reina et al. Câncer e agentes antineoplásicos ciclo-celular específicos e ciclo-celular não específicos que interagem com o DNA: uma introdução. Química Nova, 28 (2005) 118-129.
11. S. Medici, M. Peana, V. M. Nurchi, M. A. Zoroddu. Medical Uses of Silver: History, Myths, and Scientific Evidence. Journal of Medicinal Chemistry, 62 (2019) 5923-5943.
12. B. R. Pezzini, M. A. S. Silva, H. G. Ferraz. Formas farmacêuticas sólidas orais de liberação prolongada: sistemas monolíticos e multiparticulados. Revista Brasileira de Ciências Farmacêuticas - Brazilian Journal of Pharmaceutical Sciences, 43 (2007) 491-502.

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)



Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QI959	Nanomateriais e Nanoestruturas para conversão e armazenamento de energia

Vetor

Pré-Req	QI 245
---------	--------

Docente	Ana Flávia Nogueira
---------	---------------------

Ementa
Conceitos básicos e propriedades dos nanomateriais e nanoestruturas. Nanopartículas metálicas e nanopartículas semicondutoras. Confinamento quântico. Importância da interface e superfície em nanomateriais. Fotofísica de nanopartículas. Aplicações na área de conversão e armazenamento de energia. Células solares baseadas em nanomateriais.

Programa
<ul style="list-style-type: none">- Estrutura das nanopartículas- Revisão de física de semicondutores.- Estrutura de bandas ou níveis de energia? Confinamento quântico.- Nanopartículas 0D, 1D, 2D e 3D: propriedades e aspectos relevantes em síntese- Plasmons de superfície em nanopartículas metálicas- O éxciton em semicondutores e nanopartículas- Semicondutores orgânicos- Defeitos em nanopartículas e transporte eletrônico- Carbono: os vários alótropos e suas propriedades- Nanomateriais e nanoestruturas em novas energias (i) fotocatalise para degradação de compostos orgânicos e produção de combustíveis solares (redução de CO₂ e reações de quebra da molécula de água) (ii) conversão de energia solar em eletricidade (células solares orgânicas, TiO₂ /corante e perovskita) (iii) baterias de íons lítio e capacitores (v) diodos emissores luz

Bibliografia
<ol style="list-style-type: none">1- Soga, T. (ed), Nanostructured materials for solar energy conversion, Elsevier, 20072- Wilson, M., Kannangara, K., Raguse, B., Simmon, M., Nanotechnology: Basic Science and Emerging Technologies, Chapman and Hall/CRC, 20023- Garcia-Martinez, J., Nanotechnology for the Energy Challenge, Wiley-VCH, 20104- Cao, G., Wang, Y., Nanostructures and Nanomaterials: Synthesis, Properties, and Applications, Imperial College Press, 2011

Cr terios de Avalia o

Uma avalia o (a decidir se semin rio)



Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QO929	Química dos Compostos heterocíclicos: Uma Introdução

Vetor
OF:S-6 T:002 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:002 SL:002 C:002 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req
QO421/QO521

Docente
Carlos Roque Duarte Correia

Ementa
Diferenças entre heterocíclicos e heteroaromáticos, Principais classes de compostos heterocíclicos de 3, 4, 5 e 6 membros contendo um ou dois heteroátomos (N, O, S): Conceito de aromaticidade envolvendo compostos heteroaromáticos, Principais classes de compostos heteroaromáticos de 5 e 6 membros contendo um ou dois heteroátomos (N, O, S), Principais classes de compostos heteroaromáticos fundidos, Síntese de fármacos/medicamentos contendo anéis heterocíclicos

Programa
<ul style="list-style-type: none">Diferenças entre heterocíclicos e heteroaromáticosPrincipais classes de compostos heterocíclicos de 3, 4, 5 e 6 membros contendo um ou dois heteroátomos (N, O, S): aziridinas, oxetanas, azetidinas, azetidionas, pirrolidinas, tetrahidrofuranos, piperidinas.Breve revisão do conceito de aromaticidadePrincipais classes de compostos heteroaromáticos de 5 e 6 membros contendo um ou dois heteroátomos (N, O, S): furanos, tiofenos, pirróis, oxazóis, imidazóis, piridinas, pirimidinas, pirazóis, quinolinas, isoquinolinasPrincipais classes de compostos heteroaromáticos fundidos: indóis, benzofuranos, benzotiofenos, cumarinasExemplos de síntese de fármacos/medicamentos contendo anéis heterocíclicos

Bibliografia

Stefani, H. A. "Introdução à Química de Compostos Heterocíclicos", Guanabara Koogan, RJ, 2009

Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S.; Wothers, P. "Organic Chemistry", Oxford University Press, 2001.

Streitwieser, H.; Heathcock, C.; Kosower, E. M. "Introduction to Organic Chemistry", 4th Ed.; McMillan Publis. Comp., NY, 1992.

Smith, M. B. "Organic Synthesis", 2nd. Ed., McGraw Hill Inc., NY 2002.

G. Solomons, C. Fryhle, "Organic Chemistry", 7th ed., John Wiley & Sons, Inc., 2000. (Edições mais recentes também poderão ser utilizadas)

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)