

A MATRÍCULA EM DISCIPLINAS DE FÉRIAS DE INVERNO PARA ALUNOS REGULARES SERÁ NOS DIAS **24 E 25 DE JUNHO**

Obs: A QP100 é recomendada aos alunos que participarão do Programa de Estágio Docente (PED) a partir do 2s2019

<b>Disciplina:</b>	<b>QP100 - Introdução à Docência no Ensino Superior de Química I</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
<b>Turma: A</b>	<b>Prof. Dr. Gildo Giroto Junior</b>
<b>Créditos: 1</b>	<b>Vagas:</b> Mínimo: 05 e Máximo: 60
<b>Sala: Miniáuditorio</b>	Dias: <b>22/07</b> das 08h às 12h e das 14h às 18h e <b>29/07</b> das 09h às 12h e das 14h às 18h
<b>Ementa:</b>	<b>Preparação para Programa de Estágio Docência</b> EMENTA Conceitos básicos da docência para o ensino superior. Planejamento e objetivos do ensino superior; estratégias de ensino e os diferentes métodos pedagógicos; o processo ensino/aprendizagem; processos de avaliação no nível superior; ambiente virtual de aprendizagem e tecnologias para o ensino; interações em sala de aula: o papel dos professores e dos alunos; perfil dos estudantes da UNICAMP.
<b>Conteúdo Programático:</b>	Introdução ao ensino superior. Dificuldades de alunos e professores no Ensino Superior. Perfil dos estudantes e perfil dos professores Metodologia e Didática / abordagens pedagógicas / limites e possibilidades. O ciclo docente – escolha dos conteúdos, formulação de objetivos, planejamento, execução e avaliação, reflexão, elaboração de estratégias e instrumentação para o ensino. Ambientes virtuais de aprendizagem e tecnologias no ensino. Problemas no ensino superior.
<b>Bibliografia:</b>	Bordenave, J.D.P. Pereira, A.M. Estratégias de ensino-aprendizagem. 21 ed. Rio de Janeiro-Vozes, 2000. Lowman, J. Dominando As Técnicas De Ensino. Atlas, 2004. Moreira, D.A. (Org) Didática Do Ensino Superior: Técnicas E Tendências. São Paulo: Pioneira, 1997.

<b>Disciplina:</b>	<b>QP424 - Tópicos Especiais em Química Orgânica II</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
<b>Turma: O</b>	<b>Prof. Dr. James Henry Keeler (Universidade de Cambridge)</b>
<b>Créditos: 2</b>	<b>Vagas:</b> Mínimo: 05 e Máximo: 50
<b>Sala: IQ-01</b>	Dias <b>15 a 19 de Julho</b> - Segunda a Sexta das 9h às 12h e das 14h às 17h
<b>Ementa:</b>	<b>"Chemical structure and reactivity: an orbital based approach"</b> This short undergraduate course aims to develop an understanding of both molecular structure and chemical reactions from an orbital point of view. In particular, the intention is to show that an understanding of atomic and molecular orbitals, rather than being something confined to a physical chemistry course, is very helpful in understanding both the structures of a wide range of compounds and their reactions. Particular attention is paid to the relationship between orbitals and the familiar 'curly arrow' approach adopted by organic chemists. If time permits, we will also consider some more quantitative topics. The level of chemistry in this course is not especially high, and the mathematical content is minimal. Rather, the intention is to show how what are probably already familiar concepts can be thought of in a new and unified way in order to obtain a better understanding on chemistry as a whole.
<b>Conteúdo Programático:</b>	This course will be divided in two parts: there will be lectures during the morning from 9:00 to 12:00, and in the afternoon there will be a tutorial session from 14:00 to 17:00. The aim is that, by working through the associated exercises, participants will be able to consolidate their knowledge. Enquiries about the course content can be directed to James Keeler at <a href="mailto:jhk10@cam.ac.uk">jhk10@cam.ac.uk</a>
<b>Bibliografia:</b>	The course is closely based on Chemical Structure and Reactivity: an integrated approach, (James Keeler and Peter Wothers, Oxford University Press, Second Edition 2013). <a href="#">Click here for a link to the publishers website.</a> A set of notes will be provided as a online resource. We will cover Chapters 2—11, and some additional topics, time permitting.

<b>Disciplina:</b>	<b>QP427 - Tópicos Especiais em Química Orgânica V</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
<b>Turma: O</b>	<b>Prof. Dr. Peter Wothers (Universidade de Cambridge)</b>
<b>Créditos: 2</b>	<b>Vagas:</b> Mínimo: 05 e Máximo: 50
<b>Sala: IQ-01</b>	Dias <b>22 a 26 de Julho</b> - Segunda a Sexta das 9h às 12h e das 14h às 17h
<b>Ementa:</b>	<b>"Investigating Organic Mechanisms"</b> The course looks at how it is possible to deduce how an organic reaction takes place. Often there are a number of different possibilities for how reactions happen and varying the conditions such as temperature, concentrations, solvents can all lead to different outcomes. The course covers some of the different experiments that can be carried out to learn more about the particular route a mechanism takes.
<b>Conteúdo Programático:</b>	Topics included: A reminder of some key concepts from kinetics. Energy Profiles and reactions maps in one-dimension and more. Activation parameters – the determination and meaning of standard enthalpies, entropies, Gibbs energies, and volumes of activation. Kinetic isotope effects – primary, secondary, and solvent isotope effects. General and specific acid/base catalysis – how it is determined and what it tells us. The Brønsted Catalysis Law. The Hammett Equation – introduction and what can be learned from them. The meaning of non-linear relationships. Brønsted-type relationships for nucleophilic substitution reactions: the determination of and meaning of $\rho_{\text{nuc}}$ , $\rho_{\text{lg}}$ , and $\rho_{\text{eq}}$ . Their relation to effective charges, and their use in giving a view of the transition structure in a pathway. The role of the solvent – classification, meaning and use of different solvent parameters. The influence of the solvent on reaction mechanisms.
<b>Bibliografia:</b>	The following books are useful, BUT NOT ESSENTIAL. They might be useful to consult, but there is no need to purchase them. - Modern Physical Organic Chemistry, Eric V. Anslyn and Dennis A. Dougherty, University Science Books, 2006 - The Physical Basis of Organic Chemistry, H. Maskill, Oxford University Press, 1996 - Structure and Reactivity in Organic Chemistry, H. Maskill, Oxford Chemistry Primers (Number 81), 1999

A MATRÍCULA EM DISCIPLINAS PARA ALUNOS REGULARES SERÁ DE 01 A 18 DE JULHO DE 2019

INÍCIO DO SEMESTRE: 01/08/2019 - TÉRMINO DO SEMESTRE: 07/12/2019

**DISCIPLINAS DE DISSERTAÇÃO E TESE – Matrícula semestral**

Disciplina: <b>AA001</b> Turma "A"	<b>Dissertação de Mestrado</b> (Matrícula Automática para alunos regulares)
Disciplina: <b>AA002</b> Turma "A"	<b>Tese de Doutorado</b> (Matrícula Automática para alunos regulares)

**DISCIPLINAS PARA O PROGRAMA DE ESTÁGIO DOCENTE (PED)**

Disciplina: <b>CD002</b> Turma "J"	<b>Programa de Estágio Docente - Grupo B</b> Créditos: 04
Disciplina: <b>CD003</b> Turma "J"	<b>Programa de Estágio Docente - Grupo C</b> Créditos: 02

*Obs: Estas disciplinas não contam para a integralização curricular.*

**DISCIPLINAS DE SEMINÁRIO**

Disciplina: <b>QP137</b> Turma "A"	<b>Seminários - Mestrado</b> Frequentar, no mínimo 15 Seminários durante os três primeiros semestres do curso e, até o início do terceiro semestre, matricular-se na disciplina para registro do cumprimento desta exigência. Créditos: 02
Disciplina: <b>QP136</b> Turma "A"	<b>Seminários - Doutorado</b> Frequentar, no mínimo 30 Seminários durante os seis primeiros semestres do curso e, até o início do sexto semestre, matricular-se na disciplina para registro do cumprimento desta exigência. Créditos: 04

<b>Disciplina:</b>	<b>QP124 - Introdução à Química Quântica e Espectroscopia</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
<b>Turma: A</b>	<b>Prof. Dr. Nelson Henrique Morgon</b>
<b>Créditos: 04</b>	<b>Vagas:</b> Mínimo: 02 e Máximo: 30
<b>Sala: IQ-17</b>	Segundas e Quartas das 10h às 12h.

<b>Ementa:</b>	Ondas de matéria em sistemas simples. Partículas em campos de potencial variável, transições. Estrutura de átomos. A ligação química de moléculas simples. Moléculas diatômicas.
	<p>_ Aspectos Históricos. Propriedades de ondas: comprimento de onda, número de onda; período, frequência, velocidade de propagação, amplitude. Equações fundamentais da antiga teoria quântica: Planck e De Broglie.</p> <p>_ Primeiro Postulado da Mecânica Quântica. Funções de Onda: Função de onda genérica estacionária e dependente do tempo. Densidade de probabilidade e probabilidade. Funções de onda normalizadas e não-normalizadas. Funções de onda bem comportadas: contínuas, unívocas e finitas.</p> <p>_ Segundo Postulado da Mecânica Quântica. Operadores: Operador de momento linear. Criando operadores a partir de conceitos clássicos: operador de energia potencial, cinética e hamiltoniano. Soma e multiplicação de operadores. Operadores lineares. Equação de autovalores. Operadores hermitianos e funções ortogonais.</p> <p>_ Alguns Teoremas Fundamentais. Ortogonalidade. Conjunto de Autofunções Ortonormais (Delta de Kronecker). Expansão numa base. Comutação. Princípio da Incerteza de Heisenberg. Comutação de dois operadores em um conjunto de autofunções. Ortogonalidade.</p> <p>_ Terceiro postulado. Teorema do Valor Médio. Valores médios e probabilidade para valores discretos e contínuos. Autovalores e valores médios.</p> <p>_ Quarto Postulado. Equação de Schrödinger dependente do tempo. Separação de variáveis. Equação de Schrödinger independente do tempo. Solução da equação diferencial dependente apenas do tempo. A função de onda global dependente do tempo.</p> <p>_ Solução analítica da partícula na caixa unidimensional (1D). Reconhecendo o potencial. Construindo o hamiltoniano e a equação de Schrödinger. Solução analítica da equação diferencial: O uso de condições de contorno. Níveis de energia, função de onda: normalização e nós. Valor médio do operador de momento. Valor médio do operador posição: valor médio e valor mais provável.</p> <p>_ Solução analítica da partícula na caixa bidimensional (2D). Construindo o hamiltoniano e a equação de Schrödinger. Separação de Variáveis. Degenerescência. Cálculo do valor médio para mais de uma coordenada.</p> <p>_ Solução analítica da partícula no anel. Movimento circular no plano xy, construção do operador de energia cinética: momento de inércia e momento angular. Sistema de coordenadas plano polar e transformação de coordenadas cartesianas (xy) e plano polares (r, <math>\theta</math>). Solução da Eq. de Schrödinger e condições de contorno: quantização de energia, degenerescência, associação dos números quânticos com momento angular no eixo z.</p>

<b>Conteúdo Programático:</b>	<p>_ Oscilador Harmônico. Solução clássica do oscilador harmônico: frequência fundamental e constante de força. Solução da equação de Schrödinger para o oscilador harmônico envolvendo duas massas: A equação diferencial de Hermite e a quantização de energia.</p> <p>_ Rotor rígido com duas massas, centro de massa para dois corpos, mudanças da origem do sistema de coordenadas, representação da energia cinética de rotação em três dimensões: massa reduzida, momento de inércia e momento angular. Momento angular e construção do operador de momento angular em coordenadas cartesianas. Coordenadas esféricas polares e transformação de coordenadas do operador momento angular. Solução da equação de Schrödinger para o rotor rígido, separação de variáveis e quantização de energia. Funções de onda do rotor rígido: Funções associadas de Legendre e os harmônicos esféricos. Associação dos números quânticos com momento angular.</p> <p>_ Princípio Variacional e Teoria de Perturbação.</p> <p>_ O spin eletrônico.</p> <p>_ Átomo de H e Multieletrônicos.</p> <p>_ Modelo de Hartree. Definição de spin-orbitais e função de onda como produto de Hartree utilizando spin-orbitais. Determinação do valor médio de energia eletrônica de um átomo multieletrônico empregando o produto de Hartree. Integração sobre as coordenadas de spin e o valor médio da energia em termos de funções orbitais. Uma dedução simplificada do método de Hartree: modelo de partículas independentes, funções spin-orbitais ortonormais, integrais de Coulomb e as equações de Hartree. Interpretação das equações de Hartree: modelo de campo médio e autoconsistente. Distribuições de férmions e bósons: simetria e anti-simetria da função de onda. Funções de onda para o átomo de He no estado fundamental e excitados.</p> <p>_ Método de Hartree-Fock. Funções de Onda Anti-simétricas para muitos elétrons. Determinantes de Slater. Princípio de exclusão de Pauli.</p> <p>_ A ligação química de moléculas simples. Moléculas diatômicas.</p> <p>_ Teoria do Orbital Molecular.</p> <p>_ Noções de Espectroscopia e Postulados da mecânica quântica. Interação da radiação com a matéria: absorção, emissão, espalhamento e difração. Coeficientes de Einstein, noções sobre laser, momento de transição e regras de seleção.</p> <p>_ Estrutura Eletrônica. Espectroscopia de absorção e emissão UV-Visível. Espectros de emissão e absorção eletrônicas e regras de seleção. Noção sobre o efeito Stark e Zeeman. Noções sobre fotoquímica e fotofísica.</p>
<b>Bibliografia:</b>	<p>Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry by Linus Pauling and E. Bright Wilson Jr.</p> <p>Quantum Chemistry by Henry Eyring, John Walter, and George Kimball Physical Chemistry: A Molecular Approach by Donald A. McQuarrie and John D. Simon</p> <p>Molecular Spectra and Molecular Structure - Vol I by Gerhard Herzberg Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy by Daniel C. Harris and Michael D. Bertolucci</p> <p>Molecular Vibrations: The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra by Edgar Bright Wilson, J.C. Decius, and Paul C. Cross</p>

<b>Disciplina:</b>	<b>QP144 - Fundamentos da Química Inorgânica Estrutural</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
<b>Turma:</b> A	<b>Profa. Dra. Daniela Zanchet</b>
<b>Créditos:</b> 04	<b>Vagas:</b> Mínimo: 04 e Máximo: 20
<b>Sala:</b> IQ-08	Terças e Quintas das 10h às 12h

<b>Ementa:</b>	Estrutura eletrônica dos átomos e propriedades periódicas. Teoria de grupo, simetria molecular e grupos pontuais. Modelos de ligação química em moléculas e sólidos: orbitais moleculares e introdução à teoria de bandas.
<b>Conteúdo Programático:</b>	<p>Estrutura eletrônica de átomos polieletrônicos; orbitais relativísticos e acoplamento spin-órbita.</p> <p>Repulsão eletrônica e sua relação com o sistema periódico dos elementos. Propriedades periódicas; similaridades e dissimilaridades entre grupos e períodos, tendências gerais.</p> <p>Definições e teoremas de teoria de grupo;</p> <p>Representação matricial de operações de simetria e de grupos</p> <p>Simetria molecular e grupos pontuais;</p> <p>Combinação linear adaptada por simetria;</p> <p>Teoria dos orbitais moleculares aplicada a compostos inorgânicos e organometálicos;</p> <p>Extensão da teoria de orbitais moleculares aplicada a sólidos – introdução à teoria de bandas.</p>
<b>Bibliografia:</b>	<p>N. N. Greenwood, A. Earnshaw, Chemistry of the elements, 2 ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1998.</p> <p>F. A. Cotton, Chemical Applications of Group Theory, 3 ed. New York : J. Willey &amp; Sons, 1990.</p> <p>S.L. Altmann, Band theory of solids: an introduction from the point of view of symmetry. Oxford : Oxford University Press, 1991.</p> <p>J. E. Huheey, E. A. Keiter, R. L. Keiter. Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity. 4th ed. New York : Harper Collins, 1993.</p> <p>G. Herzberg, Atomic spectra and atomic structure, Dover publications, 1944.</p> <p>Bibliografia Complementar / Avançada</p> <p>Artigos selecionados.</p>

<b>Disciplina:</b>	<b>QP145 - Periodicidade</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
<b>Turma:</b> A	<b>Prof. Dr. Paulo Cesar de Sousa Filho</b>
<b>Créditos:</b> 02	<b>Vagas:</b> Mínimo: 05 e Máximo: 30
<b>Sala:</b> IQ-17	Segundas das 14h às 16h

<b>Ementa:</b>	Similaridades e dissimilaridades nos elementos químicos. Propriedades periódicas. Estudo da formação dos compostos e formação de ligações múltiplas.
----------------	--

<b>Conteúdo Programático:</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>História e tipos de tabela periódica.</li> <li>Estrutura atômica e orbitais (mecânica clássica). Mecânica quântica e Equação de Schrödinger. Orbitais atômicos e configuração eletrônica.</li> <li>Tendências periódicas: carga nuclear efetiva, raios atômicos e iônicos, energia de ionização, afinidade eletrônica, energia de orbitais.</li> <li>Eletronegatividade: Teorias de Pauling, Mulliken-Jaffé, Sanderson.</li> <li>Efeitos relativísticos.</li> <li>Relações diagonais.</li> <li>Formação de ligações múltiplas</li> <li>Metais de transição: propriedades gerais.</li> <li>Metais de transição interna</li> <li>Similaridades e dissimilaridades nos grupos 13-16: propriedades e estrutura.</li> </ol>
<b>Bibliografia:</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>Greenwood, N.N. e Earnshaw, A. - Chemistry of the Elements, Butterworth-Heinemann, 2ed., 1997.</li> <li>Rayner-Canham, G. e Overton, T. - Descriptive Inorganic Chemistry, W.H. Freeman and Company, 6ed., 2014.</li> <li>Huheey, J.E., Keiter E.A., Keiter, R.L. - Inorganic Chemistry: Principles of Structures and Reactivity, Harper Collins College Publisher, 4ed., 1993.</li> <li>Cotton, F.A., Wilkinson, G., Murilo, C.A. - Advanced Inorganic Chemistry, Wiley-Interscience, 6ed., 1999.</li> <li>Mackay, K.M., Mackay, R.A., Henderson, W. - Introduction to Modern Inorganic Chemistry, Taylor &amp; Francis, 6ed., 2002.</li> <li>Textos e artigos fornecidos pelo docente.</li> </ol>

<b>Disciplina:</b>	<b>QP222 - Métodos Físicos em Química Orgânica</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
<b>Turma: A</b>	<b>Prof. Dr. Roberto Rittner Neto</b>
<b>Créditos: 04</b>	<b>Vagas:</b> Mínimo: 05 e Máximo: 20
<b>Sala: IQ-10</b>	<b>Terças e Quintas das 10h às 12h</b>

<b>Ementa:</b>	Introdução, Espectroscopia de Infravermelho, Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear, Exercícios Combinados Envolvendo as duas Técnicas.
----------------	--

<b>Conteúdo Programático:</b>	<p>Parte I Introdução</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>Análise Elementar (fm e FM)</li> <li>Número de Insaturação</li> </ol> <p>Parte II Espectroscopia no UV/Vis</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>Introdução Teórica: Transições Eletrônicas; Absorção de Radiação</li> <li>Preparação de Amostras e Determinação de Espectros</li> <li>Cromóforos; Conceitos Relacionados (Deslocamento Batocrômico, etc.)</li> <li>Aplicações da Espectroscopia de UV/Vis (Analítica)</li> <li>Exercícios</li> </ol> <p>Parte III Espectroscopia de Infravermelho</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>Introdução</li> <li>Princípios Básicos e Regras de Seleção</li> <li>Espectrômetros de Infravermelho</li> <li>Preparação de Amostras</li> <li>Vibrações do Espectro no Infravermelho</li> <li>Absorções de Grupos Funcionais</li> <li>Efeitos Intra- e Intermoleculares; efeito do solvente</li> <li>Exemplos de Espectros do IV</li> <li>Exercícios</li> </ol> <p>Parte IV Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>Princípios Físicos Fundamentais       <ol style="list-style-type: none"> <li>O Fenômeno da Ressonância</li> <li>Deslocamento Químico           <ol style="list-style-type: none"> <li>Equivalência Química</li> <li>Estereotopismo</li> </ol> </li> <li>Acoplamento Spin-Spin           <ol style="list-style-type: none"> <li>Equivalência Magnética</li> </ol> </li> <li>Espectros de 1ª e 2ª Ordem</li> </ol> </li> <li>Espectro e Estrutura Molecular       <ol style="list-style-type: none"> <li>Moléculas Rígidas</li> <li>Moléculas Flexíveis</li> <li>Processos de Troca Química</li> </ol> </li> <li>Espectroscopia de RMN de 1H       <ol style="list-style-type: none"> <li>Preparação da Amostra e Determinação de Espectros</li> <li>Deslocamento Químico de 1H           <ol style="list-style-type: none"> <li>Efeitos Eletrônicos</li> <li>Anisotropia</li> </ol> </li> <li>Acoplamentos 1H, 1H</li> <li>Acoplamentos com Outros Núcleos</li> <li>Correlações de Deslocamentos Químicos com a Estrutura Molecular</li> <li>Técnicas Especializadas           <ol style="list-style-type: none"> <li>Varição da Intensidade do Campo Magnético</li> <li>Efeitos do Solvente</li> <li>Deuteração</li> </ol> </li> </ol> </li> </ol>
-------------------------------	--

	<p>3.7.4 Reagentes de Deslocamento Lantanídicos</p> <p>3.7.5 Dupla Ressonância</p> <p>3.7.6 Espectroscopia Diferencial (“NOE”)</p> <p>3.8 Exercícios</p> <p>4. Espectroscopia de RMN de <sup>13</sup>C</p> <p>4.1 Preparação da Amostra e Determinação de Espectros</p> <p>4.1.1 Tipos de Espectros</p> <p>4.2 Deslocamentos Químicos de <sup>13</sup>C</p> <p>4.3 Acoplamentos <sup>13</sup>C, <sup>1</sup>H</p> <p>4.4 Acoplamentos de <sup>13</sup>C para Outros Núcleos (<sup>2</sup>H, F, N, P)</p> <p>4.5 Acoplamento <sup>13</sup>C, <sup>13</sup>C</p> <p>4.6 Correlação de Deslocamentos Químicos de <sup>13</sup>C com a Estrutura Molecular</p> <p>4.7 Exercícios</p> <p>5. Espectroscopia de RMN de Outros Núcleos</p> <p>5.1 Espectroscopia de RMN de <sup>19</sup>F</p> <p>5.2 Espectroscopia de RMN de <sup>31</sup>P</p> <p>5.3 Espectroscopia de RMN de <sup>15</sup>N</p> <p>5.4 Outros Núcleos</p> <p>6. Técnicas Avançadas</p> <p>6.1. Sequências de Pulsos</p> <p>6.2. DEPT</p> <p>6.3. Técnicas Bidimensionais</p> <p>6.4. Imagens</p> <p>Parte VI</p> <p>Exercícios Combinados Envolvendo as 3 Técnicas</p>
<b>Bibliografia:</b>	<p>Bibliografia:</p> <p>SILVERSTEIN R.M. et al. Spectrometric identification of organic compounds. 8th Ed. Hoboken: Wiley, 2014.</p> <p>HESSE M.; MEIER H.; ZEEH B. Spectroscopy methods in organic chemistry. 2th Ed. New York: G. Thieme, 2007.</p> <p>PAVIA, D.L. et al. Introdução à Espectroscopia. São Paulo: Cengage, 2016.</p>

<b>Disciplina:</b>	<b>QP313 - Métodos Espectroquímicos de Análise</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
<b>Turma: A B</b>	<b>Profs. Drs. Adriana Vitorino Rossi (coordenadora), Marco Aurélio Zezzi Arruda e Ronei Jesus Poppi</b>
<b>Créditos: 04</b>	<b>Vagas: Mínimo: 03 e Máximo: 22</b>
<b>Sala: IQ-16</b>	<b>Terças e Quintas das 14h às 16h - Quintas e Sextas das 14h às 16h</b>
<b>Ementa:</b>	Métodos baseados na absorção, emissão e espalhamento da radiação eletromagnética. Sensores óticos.
<b>Conteúdo Programático:</b>	<p>Medidas de transmitância e absorbância</p> <p>Lei de Beer</p> <p>Instrumentação</p> <p>Absortividade molar e espécies absorventes</p> <p>Aplicações qualitativas e quantitativas de medidas de absorção</p> <p>Espectrometria de luminescência molecular</p> <p>Fluorescência</p> <p>Fosforescência</p> <p>Quimiluminescência</p> <p>Aplicações e métodos</p> <p>Introdução a espectroscopia no infravermelho</p> <p>Espectroscopia no infravermelho médio</p> <p>Espectroscopia no infravermelho próximo (NIR)</p> <p>Espectroscopia de Imagem</p> <p>Espectroscopia Raman</p> <p>Espectroscopia Raman amplificada por superfície (SERS)</p> <p>Tratamento de dados espectrais</p> <p>Introdução a espectrometria atômica</p> <p>Espectrometria de absorção atômica com chama (FAAS)</p> <p>Espectrometria de absorção atômica com geração de hidretos (HG-AAS)</p> <p>Espectrometria de absorção atômica com atomização eletrotérmica (ETAAS)</p> <p>Espectrometria de emissão atômica com plasma indutivamente acoplado (ICP OES)</p> <p>Espectrometria de massas com plasma indutivamente acoplado (ICP MS)</p>
<b>Bibliografia:</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>Skoog, D.A.; Holler, F.J. and Nieman, T.A.; Principles of Instrumental Analysis, 5th edition, Saunders College Publishing, 1998.</li> <li>Spectrophotometry, luminescence and colour; Science and Compliance Analytical Spectroscopy Library, volume 6, Elsevier, Amsterdam, 1995.</li> <li>Perkampus, H-H.; UV-VIS spectroscopy and its applications, Springer, 1992.</li> <li>Valeur, B.; Molecular Fluorescence, Wiley-VCH, Weinheim, 2002.</li> <li>Rendell, D.; Fluorescence and phosphorescence spectroscopy. John Wiley, New York, 1987.</li> <li>Williams, P. and Norris, K. Near - Infrared Technology - in The Agricultural and Food Industries, 2nd ed., American Association of Cereal Chemists, Inc., St. Paul, 2001.</li> <li>Welz, B. and Sperling, M. Atomic Absorption Spectrometry, 3rd ed., Wiley - VCH, Weinheim, 1999.</li> <li>J. Dedina and D. L. Tsalev, Hydride Generation Atomic Absorption Spectrometry, Wiley, Chichester, 1995.</li> <li>A. Montaser and D.W. Golightly (editores), Inductively Coupled Plasmas in Analytical Atomic Spectrometry, 2nd ed., Wiley - VCH, Weinheim, 1992.</li> <li>P. W. J. M. Boumans (editor), Inductively Coupled Plasma Emission Spectroscopy, Vols 1, 2, John Wiley, New York, 1987.</li> <li>J. S. Becker, Inorganic Mass Spectrometry, Wiley, Weinheim, 2007.</li> </ol>

<b>Disciplina:</b>	<b>QP322 - Sínteses Orgânicas</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	(QP021) ou (AA200)
<b>Turma: A</b>	<b>Prof. Dr. Luiz Carlos Dias</b>
<b>Créditos: 04</b>	<b>Vagas: Mínimo: 05 e Máximo: 30</b>
<b>Sala: IQ-17</b>	<b>Terças e Quintas das 14 às 16h</b>
<b>Ementa:</b>	Estratégias para síntese orgânica. Análise retro-sintética. Discussão de sínteses selecionadas, com ênfase em diferentes propostas sintéticas para um mesmo substrato, enfocando estratégias, metodologias modernas e clássicas, mecanismos, controle estereoquímico. Nas sínteses, ênfase em metodologias modernas para formação de ligações carbono-carbono. Exemplificação de objetivos de uma síntese acadêmica e de uma síntese industrial.
<b>Conteúdo Programático:</b>	<p>1. Estratégias para síntese orgânica: A síntese total de produtos naturais complexos permanece entre as áreas mais excitantes e dinâmicas da pesquisa química. Planejamento de síntese de moléculas orgânicas empregando o conhecimento de reações clássicas e modernas.</p> <p>2. Análise retrossintética: Síntese convergente e divergente, aplicação dos conceitos modernos de planejamento de síntese por análise retrossintética, síntese em várias etapas, problemas com químio, régio e estereosseletividade, grupos protetores, interconversão de grupos funcionais (FGI), síntons aceptores e doadores, desconexões de grupos C-X e C-C. Avaliação da necessidade de uso de grupos protetores em síntese. Grupos protetores para álcoois, fenóis, compostos carbonílicos, amins alifáticas e aromáticas, para alcenos e alcinos. Exemplos da aplicação de grupos protetores em síntese total.</p> <p>3. Discussão de sínteses selecionadas, com ênfase em diferentes propostas sintéticas para um mesmo substrato, enfocando estratégias, metodologias modernas e clássicas, mecanismos de reação, controle estereoquímico, estados de transição: síntese de produtos naturais bioativos, síntese enantiosseletiva, formação catalítica de ligação C-C enantiosseletiva, reações inter e intramoleculares de Heck, reações de acoplamento em cascatas catalisadas por Pd, reações de Diels-Alder, reações de cicloadição [3+2] promovidas por fosfinas, ciclizações catalisadas por prata, desimetração e cloração de ligações C-H, abordagens inovadoras envolvendo funcionalização de ligações C-H, funcionalização de ligações C-H em ciclobutanos, estratégia de dearomatização/Diels-Alder, síntese de quinoleína de Friedlander e anelagem de Hauser. Acoplamento multicomponentes, dimerização biomimética seguida de espirocetalização, rearranjo de Wagner-Meerwein de sulfonil oxirana, reações dominó para reduzir o uso de grupos de proteção e química de refuncionalização.</p> <p>4. Exemplificação de objetivos de uma síntese acadêmica e de uma síntese industrial: exemplos de síntese total de compostos bioativos, como ideais modernos de síntese total, desde novas estratégias e métodos aplicados a problemas complexos até a poderosa aplicação de técnicas modernas para fornecer compostos de importância funcional. Discussão de pesquisas focadas na descoberta e desenvolvimento de pequenas drogas. Métodos sintéticos relevantes para esses tipos de projetos são destacados, incluindo acoplamentos cruzados catalisados por metais, ativação de ligações C-H, catálise quiral, biocatálise e catálise fotoredox. Aplicação de novas tecnologias, como química de fluxo/manufatura contínua e modelagem computacional.</p>
<b>Bibliografia:</b>	<p>1. Artigos atuais em periódicos indexados correlacionados com temas da ementa.</p> <p>2. Wyatt, P. e Warren, S. "Organic Synthesis: Strategy and Control", John Wiley &amp; Sons, 1ª edição, Chippenham, Grã-Bretanha, 2007, 918 páginas, ISBN: 0-471-48940-5.</p> <p>3. Smith, M. B. "Organic Synthesis", McGraw-Hill, 2ª edição, Singapura, 2001, 1416 páginas, ISBN: 0-070-48242-5.</p> <p>4. Carey, F. A. e Sundberg, R. J. "Advanced Organic Chemistry, Part B: Reaction and Synthesis", Springer Verlag, 5ª edição, New York, EUA, 2008, 1322 páginas, ISBN: 0-387-68350-8.</p> <p>5. Carruthers, W. e Coldham, I., "Modern Methods of Organic Synthesis", Cambridge University Press, 5ª edição, Cambridge, Grã-Bretanha, 2004, 506 páginas, ISBN: 0-521-77830-5.</p> <p>6. Hudlicky, T. e Reed, J. W. "The Way of Synthesis: Evolution of Design and Methods for Natural Products", Wiley-VCH, 1ª edição, Weinheim, Alemanha, 2007, 1032 páginas, ISBN: 3-527-31444-7.</p> <p>7. Boger, D. L. "Modern Organic Synthesis: Lecture Notes", TSRI Press, 1ª edição, San Diego, EUA, 1999, 476 páginas, ASIN: B0006RAVMY.</p> <p>8. Nicolaou, K. C. e Sorensen, E. J., "Classics in Total Synthesis: Targets, Strategies, Methods", Wiley-VCH, 1996, 1ª edição, Weinheim, Alemanha, 821 páginas, ISBN: 978-3-527-29231-8.</p> <p>9. Nicolaou, K. C. e Snyder, S. A., "Classics in Total Synthesis II: More Targets, Strategies, Methods", Wiley-VCH, 2003, 1ª edição, Weinheim, Alemanha, 658 páginas, ISBN: 978-3-527-30684-8.</p> <p>10. Nicolaou, K. C. e Chen, J. S., "Classics in Total Synthesis III: Further Targets, Strategies, Methods", Wiley-VCH, 2011, 1ª edição, Weinheim, Alemanha, 770 páginas, ISBN: 978-3-527-32957-1.</p> <p>11. Carreira, E. M. e Kvaerno, L., "Classics in Stereoselective Synthesis", Wiley-VCH, 2009, 1ª edição, Weinheim, Alemanha, 651 páginas, ISBN: 978-3-527-29966-9.</p>
<b>Disciplina:</b>	<b>QP327 - Interpretação e Atribuição de Espectros de RMN 1D e 2D</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
<b>Turma: A</b>	<b>Prof. Dr. Cláudio Francisco Tormena</b>
<b>Créditos: 04</b>	<b>Vagas: Mínimo: 05 e Máximo: 20</b>
<b>Sala: <del>IQ-10</del> IQ-17</b>	<b>Segundas e Quartas das 18h às 20h</b>
<b>Ementa:</b>	RMN de <sup>1</sup> H, <sup>13</sup> C e outros núcleos: deslocamento químico, constantes de acoplamento, efeitos isotópicos, espectros de RMN 2D homo- e hetero-nucleares, interpretação de espectros.

<b>Conteúdo Programático:</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Momento angular e momento magnético, núcleo magnético, interação campo magnético núcleo magnético, origem do sinal em RMN</li> <li>• Deslocamento químico em espectros de RMN 1H e 13C, interpretação dos deslocamentos químicos de alguns grupos funcionais em química orgânica.</li> <li>• Padrões dos sinais em espectros de RMN de 1H.</li> <li>• Sinais de 1a e 2a ordens; não equivalência química e magnética.</li> <li>• Acoplamentos com outros núcleos (15N, 19F e 31P).</li> <li>• Efeito isotópico (efeito vibracional) no deslocamento químico.</li> <li>• Espectros de RMN 1D (1H, 13C, DEPT45, DEPT90 e DEPT135), alguns parâmetros de aquisição e de processamento. Interpretação de alguns espectros.</li> <li>• Espectros 2D homonuclear (COSY, NOESY, ROESY, TOCSY, INADEQUATE e ADEQUATE), parâmetros de aquisição e de processamento. Interpretação de alguns espectros.</li> <li>• Espectros 2D heteronuclear. Correlação a uma ligação (HSQC e HMQC) diferenças básicas entre as duas técnicas. Parâmetros de aquisição e de processamento. Interpretação de alguns espectros de HSQC e/ou HMQC.</li> <li>• Espectros de RMN 2D heteronuclear (HMBC). Parâmetros de aquisição e de processamento. Interpretação de alguns espectros.</li> <li>• Interpretação e atribuição da estrutura molecular para um conjunto de espectros de 1D e 2D para compostos com estrutura conhecida.</li> <li>• Interpretação e atribuição da estrutura molecular para um conjunto de espectros de 1D e 2D para amostras com estruturas desconhecidas.</li> </ul>
<b>Bibliografia:</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. J. H. Simpson, Organic Structure Determination using 2D NMR spectroscopy; Elsevier, 2008.</li> <li>2. T. D. W. Claridge, High-resolution NMR techniques in organic chemistry; 3rd edition; Elsevier, 2016.</li> <li>3. J. Keeler, Understanding NMR spectroscopy, 2nd edition; Wiley, 2010.</li> </ol>

<b>Disciplina:</b>	<b>QP415 - Tópicos Especiais em Química Analítica III</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
<b>Turma: O</b>	<b>Profs. Drs. José Alberto Fracassi da Silva (coordenador), Ivo Milton Raimundo Junior e William Reis de Araujo</b>
<b>Créditos: 04</b>	<b>Vagas: Mínimo: 05 e Máximo: 15</b>
<b>Sala: IQ-13</b>	<b>Segundas e Quartas das 14h às 16h</b>
<b>Ementa:</b>	<p><b>“Avanços recentes na fabricação e aplicação de sensores e microdispositivos de análise química”</b></p> <p>Introdução aos sensores químicos. Instrumentação analítica para sensores ópticos, eletroquímicos e de massa. (Nano)materiais para o desenvolvimento de sensores. Dispositivos microfluídicos e Lab-on-a-Chip. Técnicas de microfabricação e caracterização de microdispositivos. Noções de microfluídica. Sensores vestíveis. Dispositivos Point-of-Care (POC).</p>
<b>Conteúdo Programático:</b>	Introdução aos sensores físicos e químicos e conceito de transdutores. Avanços na instrumentação analítica (bio)sensores. (Nano)materiais para o desenvolvimento de sensores. Sensores ópticos – Optrodos. Sensores eletroquímicos. Sensores piezoelétricos. Sensores vestíveis, portáteis e Point ofCare (POC). Introdução à microfluídica e miniaturização de sistemas. Conceito de Lab-on-a-Chip. Integração de detectores em sistemas microfluídicos. Introdução às técnicas de microfabricação. Impressão direta 3D de dispositivos. Dispositivos em substrato de papel. Aplicações recentes no sensoriamento de espécies químicas em matrizes biológicas, forenses, industriais, farmacêuticas, alimentícias e ambientais. Experimentos de construção e aplicação de sensores ópticos, colorimétricos, eletroquímicos e dispositivos microfluídicos de análise.
<b>Bibliografia:</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1.O. S. Wolfbeis, Fiber Optic Chemical Sensors and Biosensors, Vol. 1 and Vol. 2, CRC Press, Boca Raton, 1991.</li> <li>2.J. Janata, Principles of Chemical Sensors, Plenum Press, New York, 1990.</li> <li>3. M.Madou, Fundamentals of Microfabrication: the science of miniaturization, 2nd ed., CRC Press, Boca Raton, Florida, USA, 2002.</li> <li>5. A. J. Bard, L. R. Faulkner, Electrochemical methods: fundamentals and applications. 2nd ed. New Jersey: John Wiley, 2000.</li> <li>6. J. P. Landers, Handbook of capillary and microchip electrophoresis and associated microtechniques, CRC Press, Boca Raton, 2008.</li> <li>7. C. S. Henry, Microchip capillary electrophoresis: methods and protocols, Humana Press, Totowa, New Jersey, 2006.</li> <li>8. E. W. Nery, L. T. Kubota, Sensing approaches on paper-based devices: a review, Anal. Bioanal. Chem. 2013, 405, 7573–7595.</li> <li>9. J. Heikenfeld et al, Wearable sensors: modalities, challenges, and Prospects, Lab Chip, 2018, 18, 217–248.</li> <li>10. Yufeng Zhou, The recent development and applications of fluidic channels by 3D printing, J. Biomed. Sci. 2017, 24:80.</li> <li>11. B. Gross, S. Y. Lockwood, D. M. Spence, Recent Advances in Analytical Chemistry by 3D Printing, Anal. Chem. 2017, 89, 57-70.</li> </ol>

<b>Disciplina:</b>	<b>QP416 - Tópicos Especiais em Química Analítica IV</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
<b>Turma: O</b>	<b>Profa. Dra. Márcia Cristina Breikreitz</b>
<b>Créditos: 04</b>	<b>Vagas: Mínimo: 05 e Máximo: 20</b>
<b>Sala: IQ-16 IQ-17</b>	<b>Terças e Quartas das 16h às 18h</b>
<b>Ementa:</b>	<p><b>“Estatística Aplicada”</b></p> <p>Conceitos básicos de Estatística descritiva e inferencial. Distribuições e testes estatísticos para comparações de médias, variâncias e detecção de amostras anômalas. Análise da Variância (ANOVA). Regressão linear. Introdução aos métodos multivariados de Planejamento Experimental e Análise de Componentes Principais.</p>
<b>Conteúdo Programático:</b>	<p>Medidas de posição e dispersão: média, mediana, moda, desvio padrão, coeficiente de variação. Tipos de erros: grosseiros, sistemáticos e aleatórios. Detecção de amostras anômalas: Testes de Grubb’s e Dixon. Distribuições estatísticas: Distribuição Normal, Distribuição Normal padronizada (z), Distribuição t-Studente Distribuição F: propriedades, aplicação e uso de tabelas. Intervalos de confiança para um valor médio de uma variável aleatória empregando as distribuições z e t. Testes de hipótese utilizando as distribuições z, t e F para comparação de médias e variâncias. Análise da Variância (Analysis of Variance, ANOVA). Análise da regressão: Método dos Mínimos Quadrados, cálculo dos coeficientes de regressão e intervalos de confiança, coeficientes de correlação e determinação, avaliação dos resíduos e resíduos padronizados, normalidade e homoscedasticidade. Introdução à validação de métodos: as principais figuras de mérito: linearidade, precisão, exatidão, sensibilidade, limite de detecção, limite de quantificação e robustez. Introdução à Análise multivariada: Planejamento Experimental e Análise de Componentes Principais.</p> <p>A disciplina contará com parte teórica e exercícios em lousa e empregando o software Excel, para a resolução de problemas provenientes das áreas Química e Farmacêutica.</p>

<b>Bibliografia:</b>	Miller, J.C. e Miller, J. N. Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry, 6th ed., Pearson, England, 2010. Bolton, S. Pharmaceutical Statistics: practical and clinical applications, 3rd ed., Marcel Dekker Inc., New York, 1997. Skog D. A, West D. M, Holler FJ, Crouch S. R. Fundamentos de Química Analítica, CengageLearning, São Paulo, 2006. Harris, D. C. Análise Química Quantitativa, LTC Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, 2008. Bruns, R., E., Scarminio, I., S., de Barros Neto, B. Como fazer experimentos: aplicações na ciência e na indústria, 4ª ed., Bookman, SP, 2010. Box, G. E. P., Hunter, J. S., Hunter, W. G. Statistics for Experimenters, John Wiley and Sons, New Jersey, 2005. Draper, N. e Smith. H. Applied Regression Analysis, 3rd ed., Wiley, EUA, 1998
----------------------	---

<b>Disciplina:</b>	<b>QP446 - Tópicos Especiais em Química Inorgânica IV</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
<b>Turma: O</b>	<b>Profa. Dra. Heloíse de Oliveira Pastore</b>
<b>Créditos: 02</b>	<b>Vagas:</b> Mínimo: 05 e Máximo: 10
<b>Sala: IQ-13</b>	Quartas das 16 às 18h
<b>Ementa:</b>	"Peneiras Moleculares 2D e 3D"
<b>Conteúdo Programático:</b>	Estruturas: silicatos estendidos na Natureza, zeólitos, silicatos hidratados lamelares, fosfatos lamelares. Síntese: solvotérmica e estado sólido; fatores que influenciam a síntese; aditivos; sementeira, métodos de preparação usando direcionadores orgânicos e sem o uso de orgânicos. Caracterização: difração de raios-X, ressonância magnética nuclear, espectroscopia de absorção na região do Infravermelho, espectroscopia eletrônica, métodos térmicos, porosimetria aplicados à peneiras moleculares lamelares e zeolíticas.
<b>Bibliografia:</b>	A ser fornecida pelo professor ao longo do curso.

<b>Disciplina:</b>	<b>QP447 - Tópicos Especiais em Química Inorgânica V</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
<b>Turma: O</b>	<b>Prof. Dr. André Luiz Formiga</b>
<b>Créditos: 02</b>	<b>Vagas:</b> Mínimo: 05 e Máximo: 20
<b>Sala: IQ-17</b>	Terças das 19h às 21h
<b>Ementa:</b>	"Fotossíntese Artificial" Fotossíntese natural; fotossíntese artificial; catálise e eletrocatalise em estudos de fotossíntese artificial; células fotoeletroquímicas
<b>Conteúdo Programático:</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Fotossíntese natural – visão bioinorgânica</li> <li>• Processos de transferência de energia</li> <li>• Transferência eletrônica fotoinduzida</li> <li>• Transferência eletrônica acoplada à transferência de prótons</li> <li>• Catalisadores homogêneos e heterogêneos para evolução de hidrogênio e/ou oxigênio.</li> <li>• Fixação e Redução de CO<sub>2</sub></li> <li>• Células fotoeletroquímicas</li> </ul>
<b>Bibliografia:</b>	Artigos selecionados pelo professor. Collings, A. F.; Critchley, C.; Artificial Photosynthesis: From Basic Biology to Industrial Application, Wiley, 2005. Balzani, V.; Credi, A.; Venturi, M.; Molecular Devices and Machines – A Journey into the Nano World, Wiley, 2003. Voet, D.; Voet, J.; Pratt, C.; Fundamentos de Bioquímica, Artmed, 2000.

<b>Disciplina:</b>	<b>QP448 - Química do Estado Sólido I</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
<b>Turma: A</b>	<b>Prof. Dr. Oswaldo Luiz Alves</b>
<b>Créditos: 04</b>	<b>Vagas:</b> Mínimo: 02 e Máximo: 20
<b>Sala: IQ-08</b>	Segundas das 10h às 12h e Terças das 08h às 10h
<b>Ementa:</b>	Grupos espaciais e simetria em sistemas cristalinos. Técnicas de caracterização. Teoria de bandas e sua utilização para explicação de propriedades de materiais.
<b>Conteúdo Programático:</b>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. A importância da química do estado sólido e sua abrangência.</li> <li>2. Sólidos cristalinos <ol style="list-style-type: none"> <li>2.1. Cella unitária e sistemas cristalinos. Simetria e grupos espaciais.</li> <li>2.2. Redes de Bravais, planos cristalinos e índices de Miller,</li> <li>2.3. Estruturas com empacotamento compacto e exemplos</li> <li>2.4. Defeitos, óxidos não estequiométricos, solução sólida</li> <li>2.5 Difração de raios X: princípios e exemplos práticos</li> </ol> </li> <li>3. Ligação química em sólidos: Sólidos iônicos e energia de rede, sólidos covalentes e metais.</li> <li>4. Teoria de bandas e propriedades eletrônicas <ol style="list-style-type: none"> <li>4.1 Metais</li> <li>4.2 Isolantes</li> <li>4.3 Semicondutores</li> <li>4.4. Metais de transição e a importância da banda d.</li> </ol> </li> <li>5. Propriedades de materiais (elétrica, ótica, magnética)</li> <li>6. Técnicas de caracterização aplicadas a sólidos. Exemplos.</li> </ol>
<b>Bibliografia:</b>	SANDS, D.E. Introduction to Crystallography, Revised Ed. New York, Dover Publications, INC, 1994. 192p. ISBN-10: 0486678393. HAMMOND, C. The Basics of Crystallography, 3rd Ed., International Union of Crystallography- Oxford University Press, 2009. ISBN-10: 0199546452. WEST, A.R. Solid State Chemistry and its Applications, 2nd Ed. Wiley, 2014, 582p. ISBN: 978-1-119-94294-8. HARISON, W.A. Electronic Structure and Properties of Solids - The Physics of the Chemical New York, Bond, Dover Publications, INC, 1989. 608p. ISBN-10: 0486660214. COX, P.A. The Electronic Structure and Chemistry of Solids, Oxford, Oxford Science Publications, 2005. 272p. ISBN-10: 0198552041 Bibliografia complementar a ser fornecida em aula.

<b>Disciplina:</b> <b>Pré-Requisitos:</b> <b>Turma:</b> O <b>Créditos:</b> 02 <b>Sala:</b> <del>IQ-08</del> <b>IQ-03</b>	<b>QP464 - Tópicos Especiais em Química Interdisciplinar II - INÍCIO DAS AULAS DESTA DISCIPLINA 15 DE AGOSTO</b> Não há pré-requisitos para essa disciplina. <b>Dra. Ana Olívia Tiroli Cepeda</b> <b>Vagas:</b> Mínimo: 01 e Máximo: 20 <b>40</b> Quintas das 19h às 21h
<b>Ementa:</b>	<p><b>"Propriedade Intelectual nas Indústrias Químicas e Farmacêuticas – O que faz um Profissional de Marcas e Patentes?"</b></p> <p>A proteção por Patentes. Estrutura de documento de patente. Depósito e processo de exame dos pedidos de Patente. Legislação de Propriedade Industrial brasileira e comparação com sistemas de patentes em outros países. Patentes na tomada de decisão empresarial. Informação tecnológica. Relatório de liberdade de exploração comercial. Levantamento de anterioridades de uma invenção. Estudos de casos.</p>
<b>Conteúdo Programático:</b>	<p>Módulo I</p> <p>1- A proteção por Patentes</p> <p>Objetivo: este módulo tem como objetivo aprofundar os conhecimentos sobre a proteção por patentes de invenção, especificamente nas áreas química e farmacêutica, detalhando a legislação e a estrutura básica de um documento de patente.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- O que é a proteção por Patentes e exemplos de proteções que podem ser empregadas nas áreas química e farmacêutica.</li> <li>- A Patente de Invenção e os requisitos de patenteabilidade (novidade, atividade inventiva e aplicação industrial), além de requisitos como suficiência descritiva e sua importância para a proteção que será conferida à invenção.</li> <li>- O que é patenteável e o que é vetado de proteção (Lei da Propriedade Industrial – Lei N°. 9.279/96), comparação com outras legislações (Americana e Europeia).</li> <li>- Tratados Internacionais: TRIPS e a sua influência nas leis de patentes.</li> <li>- Introdução à Lei da Propriedade Industrial (LPI – Lei N°. 9.279/96 - Lei de Patentes Brasileira): quanto dura a vigência de uma patente brasileira.</li> <li>- Exceção à regra: apresentação das patentes pipeline e mailbox e seu prazo de vigência.</li> <li>- O que é período de graça e qual a importância da não divulgação de uma invenção. Definição e importância da prioridade unionista para a invenção.</li> <li>- Qual a estrutura básica de um documento de patente? As reivindicações e sua importância na determinação do escopo de proteção de uma invenção.</li> <li>- Os diferentes tipos de reivindicações: dependentes e independentes e as diferentes categorias das mesmas.</li> <li>- Apresentação do INPI (Instituto Nacional da Propriedade Industrial), bem como a documentação necessária para o depósito.</li> </ul> <p>Módulo II</p> <p>2- Depósito e processo de exame do pedido de Patente</p> <p>Objetivos: este módulo tem como objetivo detalhar todo o processo de exame de pedidos de patentes brasileiros, bem como apresentar mecanismos de interferência de terceiros no processo de exame do INPI e identificação de oportunidades de desvio de patentes.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Diretrizes para exame de pedidos de patentes (Resolução n° 262 de 13 de janeiro de 2011);</li> <li>- Mecanismos de envolvimento de terceiros no exame de pedidos de patente pelo INPI: os subsídios técnicos ao exame, as contrarrazões e pedidos administrativos de nulidade (custos e prazos envolvidos);</li> <li>- Possibilidades de contorno de patentes farmacêuticas.</li> <li>- O acompanhamento de exames de pedidos de patente no INPI: como acompanhar um pedido, como identificar a necessidade de pagamento de taxas e/ou anuidades, bem como a necessidade de responder a exigências.</li> <li>- A polêmica participação da ANVISA no processo de exame de pedidos de patentes de produtos e processos farmacêuticos.</li> <li>- Formas de depósito de pedidos de patentes: CUP e PCT.</li> </ul> <p>Módulo III</p> <p>3- Importância das patentes para a Indústria e para o meio acadêmico</p> <p>Objetivo: este módulo tem como objetivo entender a importância de um portfólio de patentes para as empresas, quanto no sentido de exceções a regras existentes para este tipo de proteção. Além de detalhar a importância das informações contidas nos documentos de patente como fonte de informação para pesquisa e desenvolvimento. Levantamento de anterioridades.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- A importância de um portfólio de patentes: defesas de empresas em ações de infração e nulidades de patentes;</li> <li>- O objetivo de uma busca de liberdade de exploração: a importância de análises de liberdade de exploração para avaliação da possibilidade de exploração de tecnologias em diferentes países;</li> <li>- O que não se considera infração de patentes: flexibilidades permitidas pelo TRIPS.</li> <li>- Fontes de informação disponíveis e levantamento do estado da técnica: as diferentes estratégias de uso das informações contidas em documentos de patentes;</li> <li>- Ferramentas de buscas de patentes.</li> <li>- Levantamento de anterioridades de uma invenção antes de redigir um pedido de patente.</li> </ul> <p>Módulo IV</p> <p>4-Visão geral dos sistemas de patentes em outros países.</p> <p>Objetivo: apresentar aspectos gerais a respeito de legislações e regimes de patentes em outros países, com o objetivo de comparar com a legislação brasileira.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>-Como funcionam os sistemas de patentes em outros países, o que se pode patentear lá fora e aqui não.</li> <li>- Patentes nos Estados Unidos: extensões e outras formas de exclusividades.</li> <li>- Desafio de patentes nos Estados Unidos.</li> <li>- Patentes na Europa: Convenção sobre patentes europeias, formas de extensões de patentes e outros tipos de exclusividade.</li> <li>-Comparação desses sistemas com o sistema nacional.</li> </ul> <p>Módulo VI (Incorporado aos demais módulos/aulas)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Estudos de casos e/ou exercícios: os estudos de casos serão parte da abordagem de todos os módulos, sendo utilizados como forma de demonstração e exemplificação dos diferentes conceitos abordados e possuem o objetivo de melhorar o entendimento sobre os temas abordados.</li> <li>- Oportunidade de carreira na área de propriedade industrial: durante todo o curso será apresentado conteúdo prático para demonstrar quais são as atividades e responsabilidades de um profissional técnico na área de Propriedade Industrial, bem como a sua importância para o cenário da inovação e de acesso.</li> </ul>

<b>Bibliografia:</b>	<p>LEI Nº 9.279, DE 14 DE MAIO DE 1996.          BARBOSA, Denis Borges. Uma introdução à propriedade intelectual. Lumen Júris. 2ª edição, Rio de Janeiro, 2003.          MACEDO, Maria Fernanda Gonçalves. Patentes, Pesquisa &amp; Desenvolvimento : Um manual de propriedade intelectual. – Primeira Edição. Rio de Janeiro.FIOCRUZ – 2000.          TRIPS: ACORDO SOBRE ASPECTOS DOS DIREITOS DE PROPRIEDADE INTELECTUAL RELACIONADOS AO COMÉRCIO (contido no Decreto No1.355, de 30 de Dezembro de 1994).          OLIVEIRA, Ana Cláudia Dias. ESTUDOS DE PROPRIEDADE INTELECTUAL. Marcelo Nogueira, 1ª edição, Rio de Janeiro, 2018.</p>
----------------------	---

<b>Disciplina:</b>	<b>QP739 - Tópicos Especiais em Físico-Química XIII</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
<b>Turma: O</b>	<b>Prof. Dr. Leandro Martinez</b>
<b>Créditos: 02</b>	<b>Vagas:</b> Mínimo: 01 e Máximo: 20
<b>Sala: IQ-04</b>	Quartas das 21h às 23h

<b>Ementa:</b>	<p><b>"Fundamentos Computacionais de Simulações em Química"</b></p> <p>O curso pretende introduzir o aluno à programação numérica, uma ferramenta poderosa para a análise de dados e realização de simulações em qualquer ciência física.          A linguagem de escolha será "Julia", por ser uma linguagem de código livre, além de muito eficiente e intuitiva. Este será um curso de natureza fundamentalmente prática, abordando: Elementos básicos de programação numérica. Integração numérica de equações diferenciais. Condições de contorno. Análise de modos normais e componentes principais. Elementos básicos de otimização sem e com derivadas. Cinética de reações complexas. Integração de equações de movimento. Estabilidade. Simulações de Monte-Carlo. Propriedades estruturais. Cálculos de propriedades médias. Propriedades termodinâmicas.          O curso é recomendado para qualquer aluno que tenha interesse em aprender programação, independentemente de sua área de atuação.</p>
----------------	--

<b>Conteúdo Programático:</b>	<p>1 Elementos básicos de programação          1.1 Estrutura básica do programa          2 Primeiras simulações: cinética química          3 Otimização com derivadas          3.1 Minimizando com derivadas          3.2 Funções de múltiplas variáveis          4 Funções          5 Minimização sem derivadas          5.1 Gerador de números aleatórios          5.2 Minimizando <math>x^2 + y^2</math>          5.3 O método Simplex          6 Aplicando a otimização a um problema "real"          6.1 Resultado experimental          6.2 Comparação com a simulação          6.3 Descobrimo as constantes de velocidade          6.4 Refinamentos do programa          6.5 Usando funções prontas          7. Análise de dados          8. Aplicações</p>
-------------------------------	--

<b>Bibliografia:</b>	<p>J. Bezanson, A. Edelman, S. Karpinski, V. B. Shah, Julia: A fresh approach to numerical computing. <a href="https://arxiv.org/abs/1411.1607">https://arxiv.org/abs/1411.1607</a>          Julia: The Julia Programming Language; <a href="http://julialang.org">http://julialang.org</a>          D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular Simulations. Academic Press, 2002.</p>
----------------------	--

<b>Disciplina:</b>	<b>QP742 - Tópicos Especiais em Físico-Química XVI</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
<b>Turma: O</b>	<b>Prof. Dr. René Alfonso Nome Silva</b>
<b>Créditos: 02</b>	<b>Vagas:</b> Mínimo: 01 e Máximo: 30
<b>Sala: IQ-17</b>	Quartas das 14h às 16h

<b>Ementa:</b>	<p><b>"Dinâmica Química"</b></p> <p>Teoria de reações químicas. Espectroscopia de moléculas/partículas individuais. Espectroscopia resolvida no tempo.</p>
----------------	--

<b>Conteúdo Programático:</b>	<p>Revisão: teoria das colisões, superfícies de energia potencial e teoria do estado de transição. Movimento browniano, equação de difusão e de Langevin. Função de correlação e resposta linear. Teoria de Kramers. Química mono-molecular. Balanço detalhado e exchange químico. Espectroscopia ultra-rápida. Dinâmica de solvatação. Teoria de Marcus de transferência de elétron. Transferência de próton e PCET. Transferência de energia em fotossíntese e células solares.</p>
-------------------------------	---

<b>Bibliografia:</b>	<p>Steinfeld, Chemical kinetics and dynamics.          McQuarrie, Statistical Mechanics.          Chandler, Introduction to Modern Statistical Mechanics.          Mukamel, Principles of Nonlinear Optical Spectroscopy.          Discussão de artigos.</p>
----------------------	--

<b>Disciplina:</b>	<b>QP832 - Tópicos Especiais em Físico-Química VIII</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	(AA200) ou (QP124) ou (QP125)
<b>Turma:</b>	<b>O</b>
<b>Créditos:</b>	<b>04</b>
<b>Sala:</b>	<b>IQ-05</b>
	<b>Profs. Drs. Pablo Fernandes e Raphael Nagao de Sousa</b>
	<b>Vagas:</b> Mínimo: 02 e Máximo: 30
	Quartas das 19h às 23h
<b>Ementa:</b>	"Fundamentos de Eletroquímica" Definições e conceitos fundamentais; interfaces eletroquímicas: adsorção e dupla camada elétrica; adsorção de íons e moléculas neutras em eletrodos de mercúrio; modelos químicos da dupla camada: Helmholtz, Gouy-Chapman, Stern, Grahame, Bockris-Devanathan-Müller; isotermas de adsorção: Henry, Langmuir, e Frumkin; cinética de transferência de carga; equações empíricas de Butler-Volmer e Tafel; teoria de transferência eletrônica de Marcus; sobrepotenciais de ativação, ôhmicos e de transferência de massa; contribuição da dupla camada nas reações faradaicas; métodos experimentais para o estudo da interface sólido/líquido e a cinética de transferência de carga; eletrocatalise
<b>Conteúdo Programático:</b>	Definições e conceitos termodinâmicos fundamentais; interfaces eletroquímicas: adsorção e dupla camada elétrica; adsorção de íons e moléculas neutras em eletrodos metálicos; modelos químicos da dupla camada: Helmholtz, Gouy-Chapman, Stern, Grahame, Bockris-Devanathan-Müller; isotermas de adsorção: Henry, Langmuir, e Frumkin; cinética de transferência de carga; equações empíricas de Butler-Volmer e Tafel; teoria de transferência eletrônica de Marcus; sobrepotenciais de ativação, ôhmicos e de transferência de massa; contribuição da dupla camada nas reações faradaicas; métodos experimentais para o estudo da interface sólido/líquido e a cinética de transferência de carga; eletrocatalise.
<b>Bibliografia:</b>	1. BOCKRIS, J. O. M.; REDDY, A. K. N., Modern Electrochemistry 2A: Fundaments of Eletroedics. Springer: New York, 2000. 2. GILEADI, E., Physical Electrochemistry. Fundamentals, Techniques, and Applications. Wiley-VCH: Weinheim, 2011. 3. CONWAY, B. E., Theory and Principles of Electrode Processes. The Ronald Press Company: New York, 1965. 4. BARD, A. J.; FAULKNER, L. R., Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications. John Wiley & Sons: New York, 1980. 5. HAMANN, C. H.; HAMNETT, A.; VIELSTICH, W., Electrochemistry. Wiley-VCH: Weinheim, 2007. 6. TICIANELLI, E. A.; GONZALEZ, E. R., Eletroquímica: Princípios e Aplicações. Editora da Universidade de São Paulo: São Paulo, 2005. 7. SATO, N., Electrochemistry at Metal and Semiconductor Electrodes. Elsevier: Amsterdam, 1998.

<b>Disciplina:</b>	<b>QP935 - Tópicos Especiais em Físico-Química XI</b>
<b>Pré-Requisitos:</b>	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
<b>Turma:</b>	<b>O</b>
<b>Créditos:</b>	<b>04</b>
<b>Sala:</b>	<b>IQ-08</b>
	<b>Prof. Dr. Watson Loh</b>
	<b>Vagas:</b> Mínimo: 05 e Máximo: 20
	Segundas e Quartas das 16h às 18h
<b>Ementa:</b>	"Calorimetria em Solução"
<b>Conteúdo Programático:</b>	1. Revisão de tópicos de termodinâmica relevantes para estudos calorimétricos em solução 2. Breve histórico do desenvolvimento da calorimetria, seus princípios e aspectos técnicos. Exemplos de equipamentos atuais 3. Calorimetria de varredura (DSC) e aplicações no estudo de materiais e soluções (sistemas biológicos, soluções de polímeros e surfactantes) 4. Calorimetria isotérmica: titulação calorimétrica (ITC) e aplicações nos estudos de agregação de polímeros e surfactantes, interações em sistemas de interesse biológico. Calorimetria de Solução 5. Estudos cinéticos utilizando calorimetria isotérmica 6. Realização de experimentos práticos com as principais técnicas calorimétricas estudadas
<b>Bibliografia:</b>	1. Titration Calorimetry: from concept to application, L.D. Hansen, M.K. Transtrum, C. F. Quinn, Springer, 2018 2. Biocalorimetry: foundations and contemporary approaches, M. Bastos (Ed), CRC Press, 2016 3. Use of isothermal titration calorimetry to study surfactant aggregation in colloidal systems, W. Loh, C. Brinatti, K.C. Tam, Biochim. Biophys. Acta. 2016, 1860, 999-1016