

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS**  
**INSTITUTO DE QUÍMICA**  
**PÓS-GRADUAÇÃO**

**DISCIPLINA DE FÉRIAS DE VERÃO**

A matrícula deverá ser feita através da WEB-DAC no período de: **13/12/2017 a 15/12/2017**

A disciplina acontecerá no período de **29/01 a 02/02/2018**. Os alunos devem levar **laptop, com matlab instalado; deverá ser feito o download SOMENTE NA SEMANA DO INÍCIO DAS AULAS, link para o download:**

**[https://www.mathworks.com/programs/trials/trial\\_request.html?s\\_tid=hp\\_trial\\_download](https://www.mathworks.com/programs/trials/trial_request.html?s_tid=hp_trial_download)**

<b>QP417</b> Turma "L"	<b>Tópicos Especiais em Química Analítica V</b> <b><i>Matlab Fundamentals</i></b>  Profs. Drs. Márcia Cristina Breitreitz (Responsável) e José Manuel Amigo Rubio  <b>Ementa:</b> 1. Introduction to Matlab structure. Basic but essential commands. Basic Linear Algebra. 2. Graphical outputs. Basic plot commands. Handles. 3. Control flow. Loops, conditions. 4. Data managing. Initial steps of analytical tools and organizing the data. 5. Functions (libraries) in Matlab 6. Principal Component Analysis 7. Clustering and Classification 8. Images with Matlab  <b>Bibliografia:</b> Material de aula disponibilizado pelo professor.	<b>Créditos: 02</b>  <b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 30</b>
Todos os dias das 9h às 12h e das 14h às 17h		
IQ-05		

## DISCIPLINA EVENTUAL

**A matrícula deverá ser feita através do preenchimento e entrega na CPG do formulário:**

Link: [https://www.dac.unicamp.br/sistemas/formularios/inscricao\\_disciplinas\\_eventuais\\_pos\\_aut.php](https://www.dac.unicamp.br/sistemas/formularios/inscricao_disciplinas_eventuais_pos_aut.php)  
no período de: **08/01/2018 a 12/01/2018**

A disciplina acontecerá nos dias 23/01 das 08h às 12h e das 14h às 17h, 24/01 das 08h às 12h e das 14h às 17h, 25/01 das 08h às 12h

<p>QP418 Turma "L"</p> <p>23/01 das 08h às 12h e das 14h às 17h, 24/01 das 08h às 12h e das 14h às 17h, 25/01 das 08h às 12h</p> <p>IQ-14</p>	<p><b>Tópicos Especiais em Química Analítica IX</b> <i>"Statistical Analyses in Environmental Toxicology and Chemistry"</i></p> <p>Prof. Theodore Burdick Henry – Heriot Watt University, UK</p> <p><b>Ementa:</b></p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. Hypothesis generation, experimental design</li><li>2. Methods of statistical analyses (theory and application with R statistics software)</li><li>3. Interpretation and reporting of results</li></ol> <p><b>Bibliografia:</b> Material de aula disponibilizado pelo professor.</p>	<p><b>Créditos: 01</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 30</b></p>
---	---	---

## DISCIPLINAS OFERECIDAS NO 1º SEMESTRE/2018

**ATENÇÃO:** A MATRÍCULA EM DISCIPLINAS PARA ALUNOS REGULARES SERÁ DE 04 a 20 de Dezembro de 2017

**INÍCIO DO SEMESTRE: 26 de fevereiro de 2018**

**TÉRMINO DO SEMESTRE: 30 de junho de 2018**

DISCIPLINAS DE DISSERTAÇÃO E TESE – Matrícula semestral		
AA001 Turma "A"	<b>Dissertação de Mestrado</b> (Matrícula Automática para alunos regulares)	
AA002 Turma "A"	<b>Tese de Doutorado</b> (Matrícula Automática para alunos regulares)	
<b>DISCIPLINAS PARA O PROGRAMA DE ESTÁGIO DOCENTE (PED)</b> (Estas disciplinas não contam para a integralização curricular)		
CD002/J	<b>Programa de Estágio Docente</b> (Grupo B)	Créditos: 04
CD003/J	<b>Programa de Estágio Docente</b> (Grupo C)	Créditos: 02
QP137/A SEMINÁRIOS	<b>Mestrado</b> Frequentar, no mínimo 15 Seminários durante os três primeiros semestres do curso e até o início do terceiro semestre deverá se matricular na disciplina QP137/A para registro do comprimento desta exigência.	Créditos: 02
QP136/A SEMINÁRIOS	<b>Doutorado</b> Frequentar, no mínimo 30 Seminários durante os seis primeiros semestres do curso e até o início do sexto semestre deverá se matricular na disciplina QP136/A para registro do comprimento desta exigência.	Créditos: 04

QP021 Turma "A"	<b>Química Orgânica Avançada</b>  Prof. Dr. Igor Dias Jurberg	<b>Créditos: 04</b>
Segunda e Quarta das 16h às 18h  IQ-17	<p><b>Ementa:</b> Ligação química e estrutura. Estereoquímica. Análise conformacional, efeitos estéreos e estereoelétrônicos. Mecanismos de reações orgânicas: estudos de dados cinéticos e termodinâmicos, efeito isotópico, uso de informações de acidez e basicidade, efeito de solventes, intermediários de reações. Reações pericíclicas. Reações de substituição nucleofílica, adição e eliminação. Aspectos importantes de reações com organometálicos baseadas em metais de transição. Reações radicalares.</p> <p><b>Bibliografia:</b> 1) Carey, F. A., Sundberg, R. J., Advanced Organic Chemistry, Partes A&amp;B, Springer (2008) 2) Eliel, E. L &amp; Wilen, S. H., Stereochemistry of Organic Compounds, Wiley (1994) 3) Clayden, J. Greeves, N., Warren, S., Organic Chemistry, Oxford Press (2012).</p>	<b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 40</b>
QP125 Turma "A"	<b>Introdução à Termodinâmica e à Cinética</b>  Prof. Dr. Fernando Galembeck (Responsável) e Watson Loh	<b>Créditos: 04</b>
Segunda das 10h às 12h e		<b>Vagas:</b> <b>Mínimo: 01</b> <b>Máximo: 20</b>

<p>Quinta das 14h às 16h</p> <p><b>IQ-02</b></p>	<p><b>Ementa:</b> Leis da Termodinâmica, Conceito microscópico de entropia e a distribuição de Boltzmann, Funções de Estado e potencial químico, Equilíbrio de fases, Equilíbrio químico, Equilíbrio de soluções eletrolíticas, Teoria de Debye-Huckel e extensões. Leis de velocidade e mecanismos de reações, Elementos de Teoria cinética dos gases, Colisões, Fenômenos de Transporte, Dinâmica de Reações e superfícies de potencial, Teoria do estado de transição, Elementos de cinética de reações em solução.</p> <p><b>Bibliografia:</b> 1) Physical Chemistry, Ira N. Levine (6a ed., MacGraw Hill, 2008). 2) Physical Chemistry. A Molecular Approach, McQuarrie and Simon. (University Science Books, 1997). 3) Chemical Kinetics, K. J. Laidler (3a ed., Harper &amp; Row, 1987). 4) G. N. Lewis e M. Randall, Thermodynamics, 2nd ed. Mc.Graw NY 1961 (ou edição posterior). 5) G. Job e R. Rüffler, Physical Chemistry from a Different Angle, Springer Vieweg, 2011.</p>	
<p><b>QP144</b> Turma "A"</p> <p>Sexta das 10 às 12h e das 16h às 18h</p> <p><b>IQ-13</b></p>	<p><b>Fundamentos da Química Inorgânica Estrutural</b> Prof. Dr. Juliano Alves Bonacin</p> <p><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.</p> <p><b>Bibliografia Básica:</b> 1) N. N. Greenwood, A. Earnshaw, Chemistry of the elements, 2 ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1998. 2) F. A. Cotton, Chemical Applications of Group Theory, 3 ed. New York: J. Willey &amp; Sons, 1990. 3) S.L. Altmann, Band theory of solids: an introduction from the point of view of symmetry. Oxford: Oxford University Press, 1991. 4) J. E. Huheey, E. A. Keiter, R. L. Keiter. Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity. 4th ed. New York: Harper Collins, 1993. 5) G. Herzberg, Atomic spectra and atomic structure, Dover publications, 1944.</p> <p><b>Bibliografia Complementar / Avançada</b> 6) Artigos selecionados.</p>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 01</b> <b>Máximo: 20</b></p>
<p><b>QP216</b> Turma "A"</p> <p>Segunda das 16h às 18h e Quinta das 10h às 12h</p> <p><b>IQ-13</b></p>	<p><b>Técnicas Cromatográficas e Eletroforéticas</b> Profs. Drs. José Alberto Fracassi da Silva (Responsável), Fabio Augusto e Alessandra Sussulini.</p> <p><b>Ementa:</b> Fundamentos, cromatografia planar, cromatografia gasosa, cromatografia líquida, técnicas eletroforéticas.</p> <p><b>Bibliografia:</b> 1) L.R. SNYDER, J. J. KIRKLAND, Introduction to Modern Liquid Chromatography, 2a ed., John Wiley &amp; Sons, 1979. 2) L.R. SNYDER, J. J. KIRKLAND, J. L. GLAJCH, Practical HPLC Method Development, 2a ed., John Wiley &amp; Sons, 1997. 3) V.R. MEYER, Practical Performance Liquid Chromatography, 4a ed., John Wiley &amp; Sons, 2004. 4) CAROL H. COLLINS, GILBERTO L. BRAGA, PIERINA S. BONATO (coordenadores), Fundamentos de Cromatografia, Editora da Unicamp, Campinas, 2006. 5) A. WESTON, P. R. BROWN, HPLC and CE Principles and Practice, Academic Press.</p>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 20</b></p>

	<p>6) C. F. POOLE, S. K. POOLE, Chromatography Today, 2a ed., Elsevier Science, 1985.</p> <p>7) D. A. SKOOG, F. J. HOLLER, T. A. NIEMAN, Principles of Instrumental Analysis, 5a ed. Saunders College Publishing.</p> <p>8) F.R. de AQUINO NETO, D.S.S. NUNES, Cromatografia Princípios Básicos e Técnicas Afins, Interciência, Rio de Janeiro, RJ, 2003.</p> <p>9) Capillary and Microchip Electrophoresis and Associated Microtechniques, edited by James Landers, 3rd edition, CRC Press, Boca Raton, FL, USA, 2008.</p> <p>10) KUHN, R.; HOFFSTETTER-KUHN, S. Capillary electrophoresis: principles ad practice, Germany, 1993.</p>	
<p>QP227 Turma "A"</p> <p>Quinta e Sexta das 14h às 16h</p> <p>IQ-17</p>	<p><b>Fundamentos de Química Analítica</b></p> <p>Profs. Drs. Marco Aurélio Zezzi Arruda (Responsável), Jarbas José Rodrigues Rohwedder, Adriana Vitorino Rossi, Cassiana Carolina Montagner Raimundo, Leandro Wang Hantao</p> <p><b>Ementa:</b> Equilíbrio químico. Íons em Solução. Teoria de titulações. Seleção de métodos analíticos. Estatística aplicada à Química Analítica.</p> <p><b>Bibliografia:</b></p> <p>1) Vitz E. Redox Redux: Recommendation for improving textbook and IUPAC definitions. Journal of Chemical Education, 2002, 79(3):397-400.</p> <p>2) Barnum DW. Potential-pH diagrams. Journal of Chemical Education, 1982, 59(10):809-812.</p> <p>3) Skoog DA, West DM, Holler FJ, Crouch SR. Fundamentos de Química Analítica. Trad. M.Grassi; São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2006.</p> <p>4) Stumm W, Morgan JJ. Aquatic chemistry. 3rd ed.; Wiley Interscience Pub.; 1996.</p> <p>5) Butler JN. Ionic equilibrium: solubility and pH calculations. Wiley Interscience Pub.; 1998.</p> <p>6) Butler, J.N., Ionic Equilibrium: A Mathematical Approach, AddisonWesley Publish Company, Menlo Park, 1964.</p> <p>7) Miller, J.C. e Miller, J. N., * *Statistics for Analytical Chemistry, Ellis Horwood, New York, Prentice Hall, 1993.</p> <p>8) Harris, DC, Análise Química Quantitativa. Rio de Janeiro: LTC Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2008.</p> <p>9) Wänninen EV, Ingman F. Metal buffers in chemical-analysis .1. Theoretical considerations. Pure and Applied Chemistry, 1987, 59(12): 1681-1692.</p> <p>10) Hulanicki A, Ingman F, Wänninen EV. Metal buffers in chemicalanalysis .1. Practical considerations Pure and Applied Chemistry, 1991, 63(4): 639-642.</p>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 20</b></p>
<p>QP242 Turma "A"</p> <p>Segunda e Terça das 10h às 12h</p> <p>IQ-13</p>	<p><b>Métodos Físicos em Química Inorgânica I</b></p> <p>Prof. Dr. Oswaldo Luiz Alves</p> <p><b>Ementa:</b> Interação da radiação com a matéria. Espectroscopias vibracional e eletrônica. Técnicas de espalhamento.</p> <p><b>Bibliografia:</b> A ser fornecida pelo professor.</p>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 20</b></p>
<p>QP320 Turma "A"</p> <p>Segunda e Quarta das 09h às 11h</p> <p>IQ-07</p>	<p><b>Biociologia e Bioquímica Avançada</b></p> <p>Profas. Dras. Ljubica Tasic (Responsável), Luciana Gonzaga de Oliveira, Taicia Pacheco Fill</p> <p><b>Ementa:</b> Bioética e Biossegurança. Bioquímica celular. Bioinformática. DNA Recombinante. Enzimas. Biotecnologia.</p>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 20</b></p>

	<p><b>Bibliografia:</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) Artigos escolhidos para consulta de 2016 e 2017</li> <li>2) Bon, E.; Ferrara, M.; Corvo, M. et al. Enzimas em Biotecnologia: Produção, Aplicações e Mercado, Interciência, 2008.</li> <li>3) Nelson, D.; Cox, M.; Lehninger Principles of Biochemistry, 4th Ed., Freeman, 2005.</li> <li>4) Voet, D.; Voet, J.; Pratt, C.; Fundamentos de Bioquímica, Artmed, 2000.</li> <li>5) Lodish, H.; et al.; Molecular Cell Biology CD-ROM, 3rd Ed., Freeman, 1996.</li> </ol>	
<p>QP332 Turma "A"</p> <p>Segunda e Quarta das 14h às 16h</p> <p>IQ-07</p>	<p><b>QP332 - Termodinâmica Química I</b> <b>Pré-requisitos: (QP125) ou (AA200) ou (QP124)</b></p> <p>Prof. Dr. Adalberto Bono Maurizio Sacchi Bassi</p> <p><b>Ementa:</b> Fundamentos de termodinâmica química, leis, equações, métodos, fases puras e seus equilíbrios. Reações químicas. Misturas e soluções. Aplicações a diversos sistemas de interesse químico.</p> <p><b>Bibliografia:</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) Physical Chemistry: A Molecular Approach, Donald A. McQuarrie e John D. Simon, University Science Books, 1997.</li> <li>2) Problems and Solutions to Accompany McQuarrie and Simon, Physical Chemistry: A Molecular Approach, Heather Cox and Donald A. McQuarrie, University Science Books, 1997.</li> </ol>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS</b> <b>Mínimo: 01</b> <b>Máximo: 20</b></p>
<p>QP413 Turma "L"</p> <p>Quartas das 14h às 18h</p> <p>IQ-08</p>	<p><b>Tópicos Especiais em Química Analítica I</b> <b>"Estudo e desenvolvimento de abordagens didáticas para o ensino superior em química"</b></p> <p>Prof. Dr. Gildo Giroto Júnior</p> <p><b>Ementa:</b> Conceitos fundamentais em didática do ensino superior; Estratégias de ensino e os diferentes métodos pedagógicos; O processo ensino/aprendizagem; Legislação do ensino superior no Brasil; Políticas de implementação e avaliação de cursos de nível superior; Importância e necessidade da formação pedagógica do professor universitário; o ciclo docente (planejamento, execução e avaliação do processo de ensino-aprendizagem; Os objetivos de ensino, os conteúdos programáticos as estratégias de ensino-aprendizagem; As interações em sala de aula: o papel dos professores e dos alunos; as características e dificuldades dos alunos e professores nas Instituições de Ensino Superior; Recursos didáticos.</p> <p><b>Bibliografia:</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) Abreu, MCT &amp; Masetto, MT. O professor universitário em sala de aula; prática e princípios teóricos. S.Paulo, Cortez, 1980.</li> <li>2) Bordenave, J.D.P. Pereira, A.M. Estratégias de ensino-aprendizagem. 21 ed. Rio de Janeiro-Vozes, 2000.</li> <li>3) Demo, P. Educação e desenvolvimento - mito e realidade de uma relação possível e fantasiosa. São Paulo-Papirus, 1999</li> <li>4) Freire, P. Pedagogia De Autonomia: Saberes Necessários À Prática Educativa. São Paulo: Paz E Terra, 1996.</li> <li>5) Gil, A.C. Avaliação Da Aprendizagem: Metodologia Do Ensino Superior. São</li> </ol>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 20</b></p>

	<p>Paulo: Atlas, 1997. Cap 11, P.106-118.</p> <p>6) Gil, A.C. Metodologia Do Ensino Superior. São Paulo: Atlas, 1997.</p> <p>7) Guimarães, Y. A. F. ; Giordan, M. . Elementos para Validação de Sequências Didáticas. In: IX Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências, 2013, Águas de Lindoia. IX Encontro Nacional de Pesquisa em Educação em Ciências, 2013.</p> <p>8) Loughran, J.; Milroy, P.; Berry, A.; Gunstone, R.; Mulhall, P. Documenting Science Teacher'S Pedagogical Content Knowledge Through Pap-Ers. Research In Science Education. V.31, P.289-307, 2001.</p> <p>9) Loughran, J.; Mulhall, P.; Berry, A. In Search Of Pedagogical Content Knowledge In Science: Developing Ways Of Articulating And Documenting Professional Practice. Journal Of Research In Science Teaching. V.41, N.4, P.370-391, 2004.</p> <p>10) Lowman, J. Dominando As Técnicas De Ensino. Atlas, 2004.</p> <p>Moreira, D.A. (Org) Didática Do Ensino Superior: Técnicas E Tendências. São Paulo: Pioneira, 1997.</p> <p>11) Tardif, M., Lessard, C. O trabalho docente-elementos para uma teoria da docência como profissão de interações humanas. Rio de Janeiro-Vozes, 2005.</p>	
<p><b>QP414</b> <b>Turma "L"</b></p> <p><b>Terça e</b> <b>Quarta das</b> <b>14h às 16h</b></p> <p><b>IQ-17</b></p>	<p><b>Tópicos Especiais em Química Analítica II</b> <b>"Estatística Aplicada"</b></p> <p>Profa. Dra. Márcia Cristina Breitreitz</p> <p><b>Ementa:</b> Medidas de posição e dispersão: média, mediana, moda, desvio padrão, coeficiente de variação; Algarismos significativos e arredondamentos; Tipos de erros: grosseiros, sistemáticos e aleatórios; Detecção de amostras anômalas: Testes de Grubb's e Dixon; Distribuição Normal, Distribuição Normal padronizada (z), Distribuição t-Student e 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; Inferência Estatística: testes de hipótese utilizando as distribuições z, t e F para comparação de médias e variâncias; Análise da Variância (Analysis of Variance, ANOVA) para comparação de mais de duas médias; 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</p> <p><b>Bibliografia:</b></p> <p>1) Miller, J.C. e Miller, J. N. Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry, 6th ed., Pearson, England, 2010.</p> <p>2) Bolton, S. Pharmaceutical Statistics: practical and clinical applications, 3rd ed., Marcel Dekker Inc., New York, 1997.</p> <p>3) Skoog D. A, West D. M, Holler FJ, Crouch S. R. Fundamentos de Química Analítica, Cengage Learning, São Paulo, 2006</p> <p>4) Harris, D. C. Análise Química Quantitativa, LTC Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, 2008.</p> <p>5) Bruns, R, E., Scarminio, I, S., de Barros Neto, B. Como fazer experimentos: aplicações na ciência e na indústria, 4ª ed., Bookman, SP, 2010.</p> <p>6) Box, G. E. P., Hunter, J. S., Hunter, W. G. Statistics for Experimenters, John Wiley and Sons, New Jersey, 2005.</p> <p>7) Draper, N. e Smith. H. Applied Regression Analysis, 3rd ed., Wiley, EUA, 1998.</p>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 40</b></p>

<p>QP423 Turma "L"</p> <p>Terça das 16h às 18h e Quinta das 14h às 16h</p> <p>IQ-07</p>	<p><b>Tópicos Especiais em Química Orgânica I</b> <b>Química Medicinal: Bases Moleculares De Síntese De Fármacos Na Indústria Farmacêutica</b></p> <p>Profs. Drs. Fernando Antonio Santos Coelho (Responsável), Júlio Cezar Pastre, Denize Cristina Favaro, Wanda Pereira Almeida, Daniel Fábio Kawano.</p> <p style="text-align: center;"><b>CANCELADA</b></p> <p><b>Ementa:</b> proporcionar ao pós-graduando da área de Química, conhecer as principais ferramentas para a identificação de hits, protótipos e do desenvolvimento de fármacos. Abordagens clássicas e modernas. O pós-graduando deverá ao final do curso, ser capaz de compreender as limitações de ordem sintética no processo de obtenção de fármacos.</p> <p><b>Bibliografia:</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) Patrick G. L., An Introduction to Medicinal Chemistry, Oxford University Press, 2013, 5ª Edição.</li> <li>2) Silverman R.B., The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action/, Academic Press Inc., 2004.</li> <li>3) Harrold., M.W.; Zavod, R. M. Basic Concepts in Medicinal Chemistry, ASHP publications, 2013.</li> <li>4) Kerns, E. H.; Di, L. Drug-Like Properties: Concepts, Structure Design and Methods from ADME to Toxicity Optimization. Academic Press, 2008.</li> <li>5) G.C.K. Roberts, NMR of Macromolecules. A practical Approach. In NMR of Biomolecules: Towards Mechanistic Systems Biology, editado por Ivano Bertini, Kathleen S. McGreevy, Giacomo Parigi, Capítulo 15</li> </ol>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 20</b></p>
<p>QP425 Turma "L"</p>	<p><b>Tópicos Especiais em Química Orgânica III</b></p> <p><b>Métodos de elucidación estructural basados em química computacional</b></p> <p><b>DISCIPLINA MINISTRADA INTERNAMENTE NO PERÍODO DE: 18 DE A 22 DE SETEMBRO. SOMENTE OS ALUNOS QUE CURSARAM PODERÃO MATRICULAR-SE.</b></p> <p>Profs. Drs. Ronal Aloise Pilli (Responsável), Ariel M. Sarotti</p> <p><b>Ementa:</b> Introducción a la química computacional. Búsquedas conformacionales. Optimización de geometrías. Cálculos de frecuencia. Cálculos de RMN. Datos escalados y no escalados. Empleo de diferentes estándares. Cálculos de J. Efecto del solvente. Fuentes de error. Diferentes estrategias de correlación entre datos experimentales y calculados. Método CP3. Método DP4 y DP4+. Método ANN-PRA.</p> <p><b>Bibliografia:</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. Foresman, J. B.; Frisch, A. Gaussian Inc., Second Edition, 1996.</li> <li>2) Essentials of Computational Chemistry. C. J. Cramer. John Wiley &amp; Sons Ltd. 2004.</li> <li>3) Quantum Chemistry, I.N. Levine. Prentice Hall, 2000.</li> <li>4) Lodewyk, M. W.; Siebert, M. R.; Tantillo, D. J. Chem. Rev. 2011, 112, 1839.</li> <li>5) Grimblat, N.; Sarotti, A. M. Chem. Eur. J. 2016, 22, 12246.</li> </ol>	<p><b>Créditos: 01</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 20</b></p>



<p>QP436 Turma "L"</p>	<p><b>Tópicos Especiais em Físico-Química IV</b> <b>Nanopartículas de metais nobres com forma controlada: síntese, caracterização e propriedades eletrocatalíticas.</b></p> <p>Profs. Drs. Pablo Sebastián Fernández (Responsável) e Jose Solla Gullon</p> <p><b>DISCIPLINA MINISTRADA INTERNAMENTE NO PERÍODO DE: 30 DE OUTUBRO A 03 DE NOVEMBRO. SOMENTE OS ALUNOS QUE CURSARAM PODERÃO MATRICULAR-SE.</b></p> <p><b>Ementa:</b> (Electro)catalise. Efeito da estrutura superficial dos materiais. Nanopartículas de metais nobres com forma controlada. Correlação entre a forma da nanopartícula-e sua estrutura superficial. Síntese, limpeza superficial e caracterização de nanopartículas de metais nobres com forma controlada. Caracterização eletroquímica e propriedades eletrocatalíticas de metais nobres com forma controlada.</p> <p><b>Bibliografia:</b> A ser fornecida durante a disciplina.</p>	<p><b>Créditos: 01</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 22</b></p>
<p>QP447 Turma "L"</p> <p>Terça das 16h às 18h</p> <p>IQ-13</p>	<p><b>Tópicos Especiais em Química Inorgânica V</b> <b>Química Bioinorgânica</b></p> <p>Profa. Dra. Camilla Abbehausen</p> <p><b>Ementa:</b> Conceitos e definições clássicas de compostos de coordenação e bioinorgânica. Aspectos fisiológicos e patológicos relacionados aos íons metálicos em sistemas biológicos. Elementos essenciais ao organismo humano (especificamente zinco, ferro e cobre) e intoxicações por metais pesados (chumbo, mercúrio e cádmio). Complexos metálicos de platina, ouro, vanádio e prata em medicina: planejamento, síntese e aplicações.</p> <p><b>Bibliografia:</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) J. E. Huheey, E. A. Keiter, R. L. Keiter, Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity, 4a Ed., Harper Collins, 1993.</li> <li>2) D. F. Shriver, P. W. Atkins, T. L. Overton, J. P. Rourke, M. T. Weller, F. A. Armstrong, Inorganic Chemistry, 4th Ed. Oxford University Press, Oxford, 2006.</li> <li>3) H.-B. Kraatz, N. Metzler-Nolte (Eds.), Concepts and Models in Bioinorganic Chemistry. Wiley-VCH, Weinheim, 2006.</li> <li>4) B. K. Keppler, Metal complexes in cancer chemotherapy. Weinheim. VCH Verlagsgesellschaft, 1993.</li> <li>5) H. Sigel (Ed.) Metal Ions in Biological Systems - biological action of metal ions (vol.6). Marcel Dekker, New York, 1976.</li> <li>6) S. J. Lippard, J. M. Berg. Principles of Bioinorganic Chemistry. Mill Valley: Univ. Science Books, 1994.</li> <li>7) R. Bakhtiar, E.I. Ochiai, Pharmacological applications of inorganic complexes. General Pharmacology, 32, 525-540, 1999.</li> <li>8) N. Farrell, Biomedical uses and applications of inorganic chemistry. An overview. Coordination Chemistry Reviews, 232, 1-4, 2002.</li> </ol>	<p><b>Créditos: 02</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 15</b></p>
<p>QP822 Turma "L"</p> <p>Terça e Quinta das 09h às 11h</p> <p>IQ-10</p>	<p><b>Tópicos Especiais em Química Orgânica VIII</b> <b>Matabolômica por RMN</b></p> <p>Profa. Dra. Ljubica Tasic</p>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 20</b></p>

# CANCELADA

**Ementa:** Apresentação de tópicos especiais de ressonância magnética nuclear (RMN) aplicada em estudos metabolômicos e metabonômicos: micro-organismos, plantas, animais e humanos. Metabolômica aplicada ao diagnóstico de doenças. A detecção ou variação de determinados metabólitos em plasma e soro sanguíneo, urina, lágrima, e outros fluidos biológicos poderiam indicar o estado de saúde de um indivíduo.

**Bibliografia:**

- 1) Artigos escolhidos para consulta de 2015-2017
- 2) Nelson, D.; Cox, M.; Lehninger Principles of Biochemistry, 4th Ed., Freeman, 2005.
- 3) Voet, D.; Voet, J.; Pratt, C.; Fundamentos de Bioquímica, Artmed, 2000.
- 4) Lindon, J.; Nicholson, J.; Holmes, E. The Handbook of Metabonomics and Metabolomics, 1st Ed., Elsevier Science, 2007.
- 5) Whei-Mei Fan, T.; Lane, A.; Higashi, R.; The Handbook of Metabolomics, 1st Ed., Springer, Humana Press, 2012.
- 6) Prasian, J. Metabolomics - Fundamentals and Applications, InTech, 2016.

QP832  
Turma "L"

Terça e  
Quinta das  
19h às 21h

IQ-17

**Tópicos Especiais em Físico-Química VIII**  
**Quimiometria: Análise Multivariada de Dados**

Profa. Dra. Márcia Miguel Ferreira

**Ementa:**

1. Análise Multivariada:
  - Introdução
  - Preparação dos dados para análise
2. Análise Exploratória dos dados:
  - PCA Análise de Componentes Principais
  - HCA Análise Hierárquica de Agrupamentos
3. Construção de modelos de Calibração:
  - PCR Regressão por componentes principais
  - PLS Regressão por mínimos quadrados parciais
4. Construção de modelos de Classificação (Reconhecimento de Padrões):
  - KNN
  - SIMCA
5. Aplicações de acordo com o interesse dos alunos.

**Bibliografia:**

- 1) QUIMIOMETRIA: CONCEITOS, MÉTODOS E APLICAÇÕES. Márcia M C Ferreira; Editora da Unicamp (2015).

**Créditos: 04**

**VAGAS:**  
**Mínimo: 05**  
**Máximo: 25**