

Código: QA911								
Nome: Tópicos especiais em Química Analítica - Métodos avançados em cromatografia gasosa bidimensional abrangente (GCxGC)								
Nome em Inglês: Special topics in Analytical Chemistry - Advanced methods in comprehensive two-dimensional gas chromatography (GCxGC)								
Nome em Espanhol: Temas especiales en Química Analítica - Métodos avanzados en cromatografía de gases bidimensional integral (GCxGC)								
Tipo de Disciplina: Eletiva								
Tipo de Aprovação: Conceito								
Característica:								
Frequência: 75%								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: 1S/2025								
Exige Exame: Não								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
2	0	0	2	0	0	2	15	4
<b>DISCIPLINA SERÁ MINISTRADA JUNTAMENTE COM A PÓS-GRADUAÇÃO</b>								
Ocorrência nos Currículos:								
Pré-requisitos: QA282 OU QA218 OU QA313								
Docente: <b>Leandro Wang Hantao</b>								
<b>Ementa:</b> Introdução à técnica de cromatografia gasosa bidimensional abrangente. Discussão dos sistemas de detecção. Apresentação de técnicas e métodos de preparo de amostras para estudo de compostos orgânicos voláteis.								
<b>Programa:</b>								
OBJETIVOS ESPECÍFICOS/COMPETÊNCIAS								
<ul style="list-style-type: none"> <li>● Fundamentos de cromatografia gasosa (termodinâmica e cinética);</li> <li>● Dimensionalidade;</li> <li>● Separações bidimensionais (frações parciais e abrangente);</li> <li>● Modulação;</li> <li>● Sistemas de detecção (FID, ECD, VUV);</li> <li>● Espectrometria de massas (QMS, TQMS, TOFMS, FT-MS);</li> <li>● Análise qualitativa (group-type);</li> <li>● Análise qualitativa (especificação);</li> <li>● Aplicação de conceitos quimiométricos;</li> <li>● Análise quantitativa;</li> <li>● Extração sólido-líquido;</li> <li>● Extração líquido-líquido;</li> <li>● Extração em fase sólida convencional e miniaturizada;</li> <li>● Microextração em fase sólida;</li> <li>● Microextração em fase líquida;</li> <li>● Técnicas correlatas que empregam fases sorventes imobilizadas;</li> </ul>								
METODOLOGIA E ESTRATÉGIA DE ENSINO								
O curso consistirá de aulas ministradas pelo professor proponente e, quando possível, por especialistas convidados. No caso de especialistas estrangeiros, a aula será ministrada em inglês.								
Durante as aulas, os temas propostos na ementa serão abordados de forma teórica e,								

quando possível, a partir de atividades práticas de caráter demonstrativo.

#### RECURSOS DIDÁTICOS

O curso é baseado em rodas de discussão sobre textos e artigos, e material de apoio para a discussão do conteúdo do curso. Pelo menos uma aula será realizada no laboratório de pesquisa de modo a desenvolver o conteúdo da ementa.

#### **Bibliografia Básica**

- 1) Z. Liu, J. B. Phillips, Comprehensive Two-Dimensional Gas Chromatography using an On-Column Thermal Modulator Interface. <https://doi.org/10.1093/chromsci/29.6.227>
- 2) J. B. Phillips, J. Beens, Comprehensive two-dimensional gas chromatography: a hyphenated method with strong coupling between the two dimensions. [https://doi.org/10.1016/S0021-9673\(99\)00815-8](https://doi.org/10.1016/S0021-9673(99)00815-8)
- 3) L. Mondello et al. Comprehensive two-dimensional gas chromatography-mass spectrometry: A review. <https://doi.org/10.1002/mas.20158>

#### **Bibliografia Complementar**

- 1) M. Adahclour et al. Recent developments in comprehensive two-dimensional gas chromatography (GC × GC): I. Introduction and instrumental set-up. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2006.03.002>
- 2) M. Adahclour et al. Recent developments in comprehensive two-dimensional gas chromatography (GC × GC): II. Modulation and detection. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2006.04.004>
- 3) M. Adahclour et al. Recent developments in comprehensive two-dimensional gas chromatography (GC × GC): III. Applications for petrochemicals and organohalogens. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2006.03.005>
- 4) M. Adahclour et al. Recent developments in comprehensive two-dimensional gas chromatography (GC × GC): IV. Further applications, conclusions and perspectives. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2006.03.003>
- 5) J. Pawliszyn, Comprehensive sampling and sample preparation, Elsevier, 2012.
- 6) R. E. Majors, Sample preparation fundamentals for chromatography. 3989-6969EN.
- 7) J. Pawliszyn, Solid-phase microextraction: Theory Fundamentals, Wiley, 1997.
- 8) M. W. Dong, Modern HPLC for Practicing Scientists, Wiley, 2006.
- 9) H. M. McNair, James M. Miller, Nicholas H. Snow, Basic Gas Chromatography, Wiley, 2019.
- 10) O. David Sparkman, J. Throck Watson, Introduction to Mass Spectrometry: Instrumentation, Applications, and Strategies for Data Interpretation, Wiley, 2007.

Código: QA921								
Nome: <b>Métodos analíticos aplicados à metabolômica</b>								
Nome em Inglês: <i>Analytical methods applied to metabolomics</i>								
Nome em Espanhol: <i>Métodos analíticos aplicados a la metabolómica</i>								
Tipo de Disciplina: Semanal								
Tipo de Aprovação: Nota e frequência								
Característica: Regular								
Frequência: 75%								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: 1S/2025								
Exige Exame: Não								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
2	-	-	-	-	-	2	15	2
Ocorrência nos Currículos:								
Pré-requisitos: <b>QA584 + QA583</b>								
Docente: <b>Fabio Augusto</b>								
<b>Ementa:</b> Conceitos básicos em metabolômica. Amostragem e preparo de amostras. Ferramentas analíticas. Processamento de dados. Aplicações selecionadas.								
<b>Programa:</b>								
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Conceitos básicos de metabolômica</li> <li>2. Metodologias analíticas para metabolômica</li> <li>3. Amostragem, preservação e preparo de amostras</li> <li>4. Ferramentas analíticas em metabolômica: <ol style="list-style-type: none"> <li>a. Espectrometria de massas</li> <li>b. Técnicas Espectrométricas</li> <li>c. Técnicas Cromatográficas e de Eletromigração</li> <li>d. Microchips e microdispositivos</li> </ol> </li> <li>5. Tratamento de dados</li> <li>6. Aplicações selecionadas</li> </ol>								
<b>Bibliografia Básica</b>								
1) S.G. Villas-Boas, U. Roessner, M. Hansen, J. Smedsgaard, J. Nielsen: "Metabolome Analysis: an Introduction". Wiley-Interscience, Hoboken NJ – 2007. Online ISBN: 9780470105511; DOI: 10.1002/0470105518								
2) T. Hyotylainen, S. Wiedmer (eds.): "Chromatographic Methods in Metabolomics" (RSC Chromatography Monographs nº 18). Royal Society of Chemistry, Cambridge – 2013. ISBN: 978-1-84973-607-7; DOI: 10.1039/9781849737272								
3) W.J. Griffiths (ed.): "Metabolomics, Metabonomics and Metabolite Profiling". (RSC Biomolecular Sciences nº 4). Royal Society of Chemistry, Cambridge – 2008. ISBN: 978-0-85404-299-9; DOI: 10.1039/9781847558107								
<b>Bibliografia Complementar</b>								
Artigos e outros materiais disponibilizados pelo docente durante o semestre								



Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QF 934	Conceitos básicos de termodinâmica temporal

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
MA311

Docente
Adalberto B.M. S. Bassi

Ementa
Corpo, sistema, propriedade e processo. Matemática básica. Condição homogênea, estacionária e de equilíbrio. Termoestática e termodinâmica. Primeira e segunda lei da termodinâmica. Potencial químico. Igualdades diferenciais e em derivadas parciais.

Programa
<ol style="list-style-type: none"><li>1. Corpo e sistema geométrico</li><li>2. Sistema geométrico clássico e de partículas</li><li>3. Associação de grandeza termodinâmica a tipo de local</li><li>4. Propriedade e processo</li><li>5. Derivação e integração temporal</li><li>6. Propriedade extensiva e intensiva</li><li>7. Tipos de propriedades intensivas</li><li>8. Definição de equação diferencial exata e inexata</li><li>9. Exemplo de equação diferencial exata e inexata</li><li>10. Abrangência de equação diferencial exata</li><li>11. Sistema e processo homogêneo</li><li>12. Sistema e processo estacionário</li><li>13. Sistema e processo em equilíbrio</li><li>14. Processo reversível</li><li>15. Igualdade numérica e entre conjuntos de números</li><li>16. Homogeneidade absoluta</li><li>17. Comparação entre diferentes teorias</li><li>18. Sistema e processo com fronteiras especiais</li><li>19. Convenção de sinais e movimentos internos</li><li>20. Energia interna</li><li>21. Energia de estrutura rígida e conteúdo energético do sistema</li><li>22. Trabalho total e calor</li><li>23. Balanceamento energético</li><li>24. Primeira lei para diferenças finitas</li><li>25. Abrangência da equação diferencial para energia interna</li><li>26. Trabalho volumétrico, não volumétrico e expressões específicas</li></ol>

27. Entalpia e sua aplicação em processos específicos
28. Abrangência das equações diferenciais para trabalho volumétrico e entalpia
29. Exercício exemplificativo
30. Estado, subestado, informação faltante, determinismo e aplicação a meio contínuo
31. Enunciado conceitual da segunda lei
32. Estabilidade, metaestabilidade e instabilidade
33. Entropia, energias de Helmholtz e de Gibbs
34. Conceito de potencial químico
35. Sistema e processo com homogeneidade térmica, bária e de potencial químico
36. Definições matemáticas de temperatura, pressão e potencial químico
37. Igualdades diferenciais e em derivadas parciais

### **Bibliografia**

Bibliografia básica:

1. Bassi, A. B. M. S., Conceitos Fundamentais de Termodinâmica e Cinética para Reações Químicas, Editora da UNICAMP (2021).

Bibliografia Complementar:

1. Alberty, R. A., Use of Legendre Transforms in Chemical Thermodynamics - International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) Technical Report, Pure Appl. Chem., 73, 8 (2001).

2. McQuarrie, Donald A.; Simon John D., Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books (2016).

### **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
QF940	TE Interdisciplinar - Propriedade Intelectual, Inovação e Empreendedorismo

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%
<b>ELETIVA SERÁ MINISTRADA JUNTAMENTE COM A PÓS-GRADUAÇÃO</b>

Pré-Req	Não tem
---------	---------

Docente	Pablo Sebastian Fernandez
---------	---------------------------

Ementa
Introdução à propriedade intelectual. Patentes. Licenciamento de tecnologia. Empresas spin-off/startups. Estudo de mercado. Marketing e validação. Mentorias. Elaboração de modelo de negócios. Pitch deck

Programa
<ol style="list-style-type: none"><li>1. A atuação da Unicamp na área de empreendedorismo.</li><li>2. A propriedade intelectual nas Universidade e Empresas. Tipos de Inovação e a importância da propriedade intelectual. Tipos de patentes e as características de uma invenção patenteável.</li><li>3. Empreendedor: o pensamento, o comportamento, as atitudes e os objetivos. A importância das ideias e as estratégias. O poder da negociação e a venda.</li><li>4. Startups/spin off. A Startup Enxuta e o modelo de negócios. A criação do modelo. A realização de entrevistas para validação do modelo. Erros mais comuns durante o processo.</li><li>5. Inovação pensando nas necessidades das pessoas. Etapas do processo de Inovação para a criação de um produto/serviço.</li><li>6. Investimentos em startups no Brasil e no mundo. Acesso a capital. Processo de seleção de empresas por investidores.</li><li>7. A composição de equipes. Seleção de empreendedores. A cultura empreendedora. O plano de carreira. A remuneração dos funcionários.</li><li>8. O pitch. Tipos e objetivos. Estrutura e exemplos de pitches. Erros comuns.</li><li>9. O mercado. O modelo escalável. Fatores mais importante para o sucesso (e falha) das startups. O crescimento de uma empresa.</li></ol> <p><b>Objetivo da disciplina:</b> Intensificar o relacionamento da universidade com as instituições (empresas e organizações) através do canal dos temas propostos, tratados por especialistas e profissionais convidados, no contexto das atividades de ensino e pesquisa da universidade. Oferecer um panorama de temas contemporâneos relacionada a propriedade intelectual, inovação e empreendedorismo, no contexto da produção científica e tecnológica da Unicamp. Contribuir para a complementação da grade de disciplinas existentes e relacionadas aos temas, através de palestras, atividades práticas e discussões estruturadas abertas à comunidade. Palestrantes: especialistas e profissionais convidados.</p>

### **Bibliografia**

#### Bibliografia Básica

- OSTERWALDER, A. e cols. Value Proposition Design: Como construir propostas de valor inovadoras: Alta Books; 1ª edição (1 março 2019)
- ERIC RIES. A startup enxuta: Como usar a inovação contínua para criar negócios radicalmente bem-sucedidos. Editora Sextante; 1ª edição (25 outubro 2019)
- OSTERWALDER, A; PIGNEUR, YVES. Business Model Generation: Inovação Em Modelos De Negócios. Alta Books; 1ª edição (26 julho 2011)

Bibliografia Complementar / Avançada

### **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
QG972	Laser - Fundamentos e aplicações em Química

Vetor
OF:S-6 T:001 P:000 L:000 O:001 D:000 HS:002 SL:001 C:002 AV:C EX:N FM:75%
<b>ELETIVA SERÁ MINISTRADA JUNTAMENTE COM A PÓS-GRADUAÇÃO</b>

Pré-Req	Nenhum
---------	--------

Docentes	René Alfonso Nome Silva, Ivo Milton Raimundo Júnior e Diego Pereira dos Santos
----------	--

Ementa
Interação da radiação com a matéria. Laser. Aspectos de segurança. Aplicações em espectroscopia molecular e espectroscopia de nanomateriais.

Programa
<ol style="list-style-type: none"><li>1. Apresentação da disciplina, aula introdutória</li><li>2. Interação da radiação com a matéria: modelo clássico</li><li>3. Interações ressonantes fundamentais: absorção, emissão espontânea, emissão estimulada</li><li>4. O laser: sistemas de 2 níveis, 3 níveis, 4 níveis</li><li>5. Propriedades do laser e aspectos de segurança</li><li>6. Avaliação 1</li><li>7. Introdução à espectroscopia Raman</li><li>8. Aplicações do Raman e efeito ressonante</li><li>9. Espectroscopia Raman intensificada por superfícies (SERS)</li><li>10. Aplicações do SERS</li><li>11. Introdução aos Métodos Espectrométricos de Análise</li><li>12. Espectroscopia de Emissão Óptica em Plasma Induzido por Laser (LIBS): Fundamentos</li><li>13. LIBS: aplicações</li><li>14. Nanoparticle Enhanced LIBS</li><li>15. Avaliação final: apresentações de seminários</li></ol>

Bibliografia
Será fornecida pelos docentes ao longo 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)



Código: <b>QG975</b>								
Nome: <b>Aplicação de Tecnologias de Realidade Aumentada e Animações na Divulgação Científica e Ensino em Química.</b>								
Nome em Inglês: <b>Application of Augmented Reality Technologies and Animations in Scientific Dissemination and Chemical Education.</b>								
Nome em Espanhol: <b>Aplicación de Tecnologías de Realidad Aumentada y Animaciones en Divulgación Científica y Educación Química.</b>								
Tipo de Disciplina: <b>Semanal</b>								
Tipo de Aprovação: <b>Por conceitos "Suficiente ou Insuficiente"</b>								
Característica: <b>Regular</b>								
Frequência: <b>75%</b>								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: <b>Semestral / A critério da Unidade de Ensino</b>								
Exige Exame: <b>Sim</b>								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
<b>1</b>	-	-	<b>1</b>	-	-	<b>15</b>	<b>15</b>	<b>2</b>
<b>DISCIPLINA SERÁ MINISTRADA JUNTAMENTE COM A PÓS-GRADUAÇÃO</b>								
Ocorrência nos Currículos:								
Pré-requisitos: <b>QO321 + QI246</b>								
Docente: <b>Paulo César Muniz De Lacerda Miranda</b>								
Ementa: <b>Introdução. Editores gráficos de rasterização e vetoriais. Modelagem, edição e animação 3D. Fundamentos do Blender. Visualização Avançada e Animação. Aplicação em Projetos de Divulgação Científica. Aplicação em Projetos de Ensino de Química. Modelagem de Objetos Básicos de Laboratório e Impressão 3D. Apresentação de Projetos e Feedback.</b>								
Programa:								
1. Introdução.								
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Introdução à comunicação científica e visualização de dados.</li> <li>• Fundamentos da comunicação científica.</li> <li>• Exemplos bem-sucedidos de visualização científica.</li> </ul>								
2. Editores gráficos de rasterização e vetoriais.								
<ul style="list-style-type: none"> <li>• GIMP.</li> <li>• Inkscape.</li> <li>• Krita.</li> </ul>								
3. Modelagem, edição e animação 3D.								
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Blender.</li> <li>• Vectary.</li> </ul>								
4. Fundamentos do Blender.								

- Interface e ferramentas básicas.
- Modelagem básica e técnicas de texturização.
- Hierarquia, manipulação de objetos e coleções.
- Introdução à iluminação e renderização.
- Modificadores e o Geometry Nodes.
- Importação de Dados Químicos.

#### 5. Visualização Avançada e Animação.

- Técnicas avançadas de modelagem e texturização.
- Animação básica e princípios de movimento.
- Criação de sistemas de partículas.
- Aplicação de campos de força.
- A física no Blender.

#### 6. Aplicação em Projetos de Divulgação Científica.

#### 7. Aplicação em Projetos de Ensino de Química.

#### 8. Modelagem de Objetos Básicos de Laboratório e Impressão 3D.

#### 9. Apresentação de Projetos e Feedback.

#### **Bibliografia Básica**

- 1) KENT, B. R. **3D Scientific Visualization with Blender (IOP Concise Physics)**. Morgan & Claypool, 2015, ISBN: 978-1-6270-5611-3, 105 p.
- 2) MULLEN, T. **Bounce, Tumble, and Splash! Simulating the Physical World with Blender 3D**, Wiley Publishing, Inc., 2008, ISBN 978-0-470-19280-1, 400 p.
- 3) JAMES, D. **Crafting Digital Media: Audacity, Blender, Drupal, GIMP, Scribus, and Other Open Source Tools**. Apress, 2005, ISBN: 978-1-4302-1887-6, 414 p.

#### **Bibliografia Complementar**

- 1) KUHLMAN, C.; WELTERS, F. **GIMP: Beginner's Guide**. Apress, ISBN: 979-8-8683-9327-3, 2023, 129 p.
- 2) KIRSANOV, D. **The Book of Inkscape: The Definitive Guide to the Graphics Editor**, 2<sup>nd</sup> Ed. No Starch Press, 2021, 576 p.
- 3) SCHWABISH, J. **Better Data Visualizations A Guide for Scholars, Researchers, and Wonks**. Columbia University Press, ISBN: 978-0-231-19311-5, 2021, 449.
- 4) GEROIMENKO, V. **Augmented Reality in Education - A New Technology for Teaching and Learning**. Springer Nature Switzerland AG, ISBN: 978-3-030-42155-7, 2020, 414.
- 5) NEE, A. Y. C.; ONG, S. K. **Springer Handbook of Augmented Reality**. Springer Nature Switzerland AG, ISBN 978-3-030-67821-0, 2023, 925 p.



<b>Disciplina Eletiva</b>	
<b>Código</b>	<b>Nome</b>
QI942	Fundamentos de Química Bioinorgânica e Medicinal

<b>Vetor</b>
<b>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%</b>

<b>Pré-Req</b>	Química Geral
----------------	---------------

<b>Docente</b>	Pedro Paulo Corbi
----------------	-------------------

<b>Ementa</b>
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.

<b>Programa</b>
<ol style="list-style-type: none"><li>1. Breve histórico sobre a Química Medicinal e a Química Bioinorgânica.</li><li>2. Conceitos fundamentais da Química Bioinorgânica. Elementos essenciais e suas funções no organismo humano.<ol style="list-style-type: none"><li>2.1. Os metais e a composição do corpo humano.<ol style="list-style-type: none"><li>2.1.1. Cobre e zinco: cofatores enzimáticos;</li><li>2.1.2. Ferro em sistemas biológicos;</li><li>2.1.3. A importância de outros elementos essenciais tais como cálcio, sódio e potássio e de alguns elementos-traço tais como molibdênio e cobalto, dentre outros.</li><li>2.1.4. Intoxicações por metais pesados: principais fontes de contaminação e a terapia da quelação.</li></ol></li><li>3. O uso de metais e seus compostos em medicina: histórico e atualidades.<ol style="list-style-type: none"><li>3.1. O desenvolvimento de complexos de platina no tratamento do câncer: atividades citotóxicas da cisplatina e da carboplatina;</li><li>3.2. Complexos de ouro como anti-inflamatórios: auranofina e outros tiolatos de ouro;</li><li>3.3. A prata e seus compostos como agentes antimicrobianos;</li><li>3.4. Perspectivas de usos de complexos de rutênio, cobre, prata e ouro como fármacos anticâncer.</li></ol></li><li>4. Sistemas de liberação de fármacos: uma introdução.</li></ol></li></ol>

<b>Bibliografia</b>
<ol style="list-style-type: none"><li>1. H.-B. Kraatz, N. Metzler-Nolte (Eds.), Concepts and Models in Bioinorganic Chemistry. Wiley-VCH, Weinheim, 2006.</li><li>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.</li><li>3. B. K. Keppler, Metal complexes in cancer chemotherapy. Weinheim. VCH Verlagsgesellschaft, 1993.</li><li>4. H. Sigel (Ed.) Metal Ions in Biological Systems-biological action of metal ions (v.6). Marcel Dekker, New York, 1976.</li><li>5. S. J. Lippard, J. M. Berg. Principles of Bioinorganic Chemistry. Mill Valley: Univ. Science Books, 1994.</li><li>6. H. E. Beraldo, A Química Inorgânica na terapia do câncer. Cadernos temáticos de Química Nova</li></ol>

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
QI951	Catálise Heterogênea

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%
<b>DISCIPLINA SERÁ MINISTRADA JUNTAMENTE COM A PÓS-GRADUAÇÃO</b>

Pré-Req	Nenhum
---------	--------

Docente	Heloise de Oliveira Pastore Jensen
---------	------------------------------------

Ementa
Termodinâmica e cinética do processo catalítico. A quantificação da catálise. Catálise Ácida. Oxidação Catalítica, Redução/Hidrogenação Catalítica, Catálise Ambiental, Caracterização de Catalisadores.

Programa
<ol style="list-style-type: none"><li>1. Introdução: histórico e definições, cinética e catálise, termodinâmica. Conceitos fundamentais;</li><li>2. Mecanismos: representação e etapas fundamentais;</li><li>3. Catálises Homogênea e Heterogênea;</li><li>4. Catálise ácida: conceitos fundamentais, zeólitos, medidas de acidez de Lewis e de Bronsted em sólidos, mecanismos. Desenho de catalisadores. Processos ácidos industriais;</li><li>5. Oxidação catalítica: conceitos, desenho de catalisadores, processos industriais;</li><li>6. Hidrogenação/Redução catalítica: conceitos, desenho de catalisadores, processos industriais;</li><li>7. Catálise Ambiental: conceitos, desenho de catalisadores, principais tecnologias catalíticas;</li><li>8. Caracterização de catalisadores: métodos espectroscópicos e adsorção.</li></ol>

Bibliografia
<u>Bibliografia Básica:</u> <ol style="list-style-type: none"><li>1. Catalysis, from principles to applications, M. Beller, A. Renken, R. von Santen, Wiley-VCH (2012).</li><li>2. Heterogeneous Catalysis, fundamentals and applications, J. R. H. Ross, Elsevier (2012).</li><li>3. Fundamental Concepts in Heterogeneous Catalysis, J. K. Norskov, F. Studt, F. Abild-Pedersen, T. Bligaard, Wiley (2014).</li><li>4. Heterogeneous Catalysis for the Synthetic Chemistry, R. L. Augustine, Marcel Dekker (1996).</li><li>5. Perspectives in Catalysis, a "Chemistry for the 21st Century" monograph, Blackwell Scientific Publications (1992)</li></ol>
<u>Bibliografia Complementar / Avançada:</u> <ol style="list-style-type: none"><li>1. Model Systems in Catalysis, single crystals to supported enzyme mimics, R. M. Rioux, Springer (2010).</li><li>2. Modern Developments in Catalysis, G. Hutchings, M. Davidson, R. Catlow, C. Hardacre, N.</li></ol>

Turner, P. Collier, World Scientific (2017)

3. Supported Metal Complexes, F. R. Hartley, D. Riedel Publishing Co. (1993).

#### **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
QI958	Metodologia Científica e Química

#### Vetor

OF:S-6 T:001 P:000 L:000 O:001 D:000 HS:002 SL:001 C:002 AV:C EX:N FM:75

#### DISCIPLINA SERÁ MINISTRADA JUNTAMENTE COM A PÓS-GRADUAÇÃO

**Pré-Req** Não tem

**Docente** André Luiz Barboza Formiga

#### Ementa

Metodologia científica; método científico na história da química; formação científica e tecnológica; ética e integridade acadêmica.

#### Programa

- Elementos e evolução do método científico; paradigmas e revoluções científicas;
- Formação do pensamento científico e tecnológico; obstáculos epistemológicos para a formação do pensamento científico;
- Relação entre pesquisa fundamental e aplicada;
- Importância da análise, da síntese e da avaliação na prática científica;
- Análise de trabalhos científicos historicamente importantes para o desenvolvimento de alguns conceitos fundamentais em química;
- Ética e integridade acadêmica; atuação científica perante o próprio indivíduo e a sociedade.

#### Bibliografia

Bachelar, G.. A formação do espírito científico. Rio de Janeiro: Contraponto, 1996.  
Bloom, B. S. (ed.). Taxionomia de objetivos educacionais. 8a ed. Porto Alegre: Globo, 1983.  
Descartes, R. Discurso do método. Nova fronteira, 2011.  
Köche, J. C. Fundamentos de metodologia científica. 34a ed. Petrópolis: Vozes, 2015.  
Kuhn, T. S.. A estrutura das revoluções científicas. 13a ed. São Paulo: Perspectiva, 2017.  
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)

Código: <b>Q0852</b>								
Nome: <b>Introdução à Catálise Assimétrica</b>								
Nome em Inglês: <b>Introduction to Asymmetric Catalysis</b>								
Nome em Espanhol: <b>Introducción a la Catálisis Asimétrica</b>								
Tipo de Disciplina: <b>Semanal</b>								
Tipo de Aprovação: <b>Nota e Frequência</b>								
Característica: <b>Regular</b>								
Frequência: <b>75%</b>								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: <b>Semestral / Todos os períodos</b>								
Exige Exame: <b>Sim</b>								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
<b>2</b>	-	-	-	-	-	<b>2</b>	<b>15</b>	<b>2</b>
Ocorrência nos Currículos:								
Pré-requisitos: <b>Q0321 + *Q0521</b>								
Docente: <b>Caio Costa Oliveira</b>								
Ementa: <b>Modos de indução assimétrica. Catálise com ácidos e bases de Lewis. Outros modos de ativação além de ácidos e bases de Lewis. Indução assimétrica em catálise enantioselectiva. Interações não-clássicas entre substrato e catalisador. Resolução cinética e resolução cinética dinâmica. Efeitos não-lineares e autocatálise. Sistemas catalíticos bifuncionais, dualísticos e multifuncionais. Reações de dessimetração. Aplicações na preparação de moléculas complexas.</b>								
Programa:								
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Introdução à catálise: definições, motivação e considerações gerais</li> <li>2. Ácidos e Bases de Lewis</li> <li>3. Interações entre substrato e catalisador: efeitos eletrônicos, efeitos estéricos, efeitos estereo- eletrônicos, estados de transição, considerações físico-químicas.</li> <li>4. Métodos de resolução: definições, princípios e estudo de casos</li> <li>5. Efeitos não lineares e autocatálise: definições e estudo de casos</li> <li>6. Catálise com complexos metálicos: definições, etapas elementares e estudo de casos</li> <li>7. Organocatálise: definições, modos de ativação e estudo de casos</li> <li>8. Sistemas catalíticos bifuncionais e multifuncionais: definições, estudo de casos e elementos de design</li> <li>9. Exemplos de aplicações na preparação de moléculas complexas</li> </ol>								
<b>Bibliografia Básica</b>								
1) WALSH, P; KOZLOWSKI, M. <b>Fundamentals of Asymmetric Catalysis</b> . 1 Ed. Sausalito: University Science Books, 2009, 674 p.								
2) CLAYDEN, J.; GREEVES, N.; WARREN, S. <b>Organic Chemistry</b> . 2 Ed. Oxford: Oxford University Press, 2012, 1234 p.								
3) SOLOMONS, G.; FRYHLE, C.B.; SCOTT, S. A. <b>Química Orgânica</b> . 12 Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2018, 656p, Volume 1.								
<b>Bibliografia complementar</b>								
1) STEINBORN, D. <b>Fundamentals of Organometallic Catalysis</b> . Weinheim: Wiley-VCH, 2011, 472 p.								
2) BERKESSEL, A.; GROGER, H. <b>Asymmetric Organocatalysis: From Biomimetic Concepts to Applications in Asymmetric Synthesis</b> . Weinheim: Wiley-VCH, 2005, 440 p.								
3) SOLOMONS, G.; FRYHLE, C.B.; SCOTT, S. A. <b>Química Orgânica</b> . 12 Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2018, 600p, Volume 2.								



- 4) COSTA, P.; PILLI, R.; PINHEIRO, S. **Substâncias Carboniladas e Derivados**. São Paulo: Editora da Sociedade Brasileira de Química, 2019, 464 p.
- 5) Artigos selecionados no contexto da disciplina.

Código: <b>Q0859</b>								
Nome: <b>Química Orgânica Computacional Aplicada</b>								
Nome em Inglês: <b>Applied Computational Organic Chemistry</b>								
Nome em Espanhol: <b>Química Orgánica Computacional Aplicada</b>								
Tipo de Disciplina: <b>Semanal</b>								
Tipo de Aprovação: <b>Nota e Frequência</b>								
Característica: <b>Regular</b>								
Frequência: <b>75%</b>								
Tipo de Período / Período de Oferecimento: <b>Semestral / A critério da Unidade de Ensino</b>								
Exige Exame: <b>Sim</b>								
Vetores								
T	L	P	O	PE	OE	SL	SEMANAS	CRÉDITO
<b>2</b>	-	-	-	-	-	<b>2</b>	<b>15</b>	<b>2</b>
Ocorrência nos Currículos:								
Pré-requisitos: <b>Q0521 ou Q0327 ou Q0323 ou Q0421</b>								
Docente: <b>Rodrigo Antonio Cormanich</b>								
Ementa: <b>Métodos em Química Computacional, Softwares, Básico de Linux e programação, Cálculos de energia, otimização e frequência, superfícies de energia potencial, barreiras de energia e de rotação, análise conformacional, estudos de reações em química orgânica, cálculos de estados de transição e IRC, cálculos de obtenção de propriedades eletrônicas e espectroscópicas, cálculos baseados em orbitais moleculares e densidade eletrônica, cálculos teóricos para entendimento de estrutura e reatividade de compostos orgânicos.</b>								
Programa:								
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Softwares de cálculos computacionais e interfaces gráficas.</li> <li>2. Métodos de química computacional: MM, SE, ab initio e DFT.</li> <li>3. Superfícies de energia potencial e cálculos de otimização e frequência</li> <li>4. Introdução à comandos básicos e programação no Linux</li> <li>5. Análise conformacional de moléculas orgânicas</li> <li>6. Cálculos de parâmetros espectroscópicos</li> <li>7. Estudos de reações orgânicas simples utilizando-se cálculos teóricos</li> <li>8. Métodos interpretativos da função de onda baseados em orbitais moleculares</li> <li>9. Métodos interpretativos da função de onda baseados em densidade eletrônica</li> </ol>								
<b>Bibliografia Básica</b>								
<ol style="list-style-type: none"> <li>1) Material disponibilizado pelo professor.</li> <li>2) JENSEN, F. <b>Introduction to Computational Chemistry</b>: John Wiley &amp; Sons, 2a Ed., 2007.</li> <li>3) HEHRE, W. J.; SHUSTERMAN, A. J.; NELSON, J. E. <b>The Molecular Modelling Workbook for Organic Chemistry</b>, 6th Ed., Prentice Hall, 2005.</li> </ol>								
<b>Bibliografia complementar</b>								
<ol style="list-style-type: none"> <li>1) LEWARS, E. <b>Computational Chemistry</b>: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics, Kluwer Academic Publishers, 2004</li> <li>2) WEINHOLD, F. <b>Valency and Bonding</b>: A Natural Bond Orbital Donor-Acceptor Perspective, University of Wisconsin, Madison, Clark R. Landis, University of Wisconsin, Madison 2009</li> <li>3) FORESMAN, J. B; A. <b>Frisch Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods</b>, 3rd ed., Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2015.</li> <li>4) BADER, R. F. W. <b>Atoms in Molecules</b>: A Quantum Theory, Oxford University Press, 1994.</li> <li>5) CREMER, C. J. <b>Essentials of Computational Chemistry</b>: Theories and Models, 2nd Ed., Wiley, 2004.</li> </ol>								