



Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QA851	Validação de Métodos Analíticos

Vetor
OF:S-5 T:002 P:000 L:000 O:000 D:000 HS:002 SL:002 C:002 AV:N EX:S FM:75%

Pré-Req	QA584
---------	-------

Docente	Susanne Rath
---------	--------------

Ementa
Validação de métodos analíticos

Programa
Garantia de qualidade: validação, controle de qualidade interno, teste de proficiência, acreditação. Sistemas de normas ISO. Qualificação instrumental e operacional. Calibração. Validação de métodos analíticos. Parâmetros de validação: faixa linear, linearidade, efeito matriz, seletividade, precisão (repetibilidade, e reprodutibilidade), exatidão, robustez, limite de detecção e limite de quantificação. Tratamento estatístico de dados e uso de planilhas. Homogeneidade das variâncias. Identificação de resultados anômalos, testes de significância da regressão. Incertezas. Protocolos de validação e aspectos de legislação.

Bibliografia
<ol style="list-style-type: none"><li>1. Instituto Nacional de Metrologia, Normalização e Qualidade Industrial (INMETRO). Orientações sobre Validação de Métodos de Ensaio Químicos, DOQ-CGCRE-008, 2ª revisão, 2007.</li><li>2. Instituto Nacional de Metrologia, Normalização e Qualidade Industrial (INMETRO); Orientações sobre Validação de Métodos de Ensaio Químicos, DOQ-CGCRE-008, 4ª revisão, 2011.</li><li>3. International Conference on Harmonization (ICH); Validation of Analytical Procedures: Text and methodology Q2 (R1), 2005.</li><li>4. Thompson, M.; Ellison, S. L. R.; Wood, R. <i>Pure Appl. Chem.</i> 2002, 74, 835-855.</li><li>5. Eurachem; The Fitness for Purpose of Analytical Methods. A Laboratory Guide to Method Validation and Related Topics, 1998.</li><li>6. Miller, J.C; Miller, J.N. <i>Statistics for Analytical Chemistry</i>. Ellis Horwood, 3<sup>rd</sup> ed. 1993.</li><li>7. ANVISA – Consulta Pública nº 129, de 12 de fevereiro de 2016.</li></ol>

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
QF947	Determinação de potencial zeta em sistemas nanoestruturados

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%

Acompanha disciplina de pós-graduação.

Pré-Req	QF531
---------	-------

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

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

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

**Bibliografia**

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

**Cr terios de Avalia o**

Cr terios de avalia o definidos pelo Professor, com base no disposto na Se o I – Normas Gerais, Cap tulo V – Da Avalia o do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Gradua o. Frequ ncia: 75 % (\* O abono de faltas ser  considerado dentro do previsto no cap tulo VI, se o X, artigo 72 do Regimento Geral de Gradua o)



Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QG969	Simetria e suas Consequências na Química

<b>Vetor</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>Pré-Req</b>	QI145 QO321
----------------	----------------

<b>Docentes</b>	Emilio Carlos de Lucca Júnior Paulo Cesar de Sousa Filho
-----------------	---

<b>Ementa</b>
1) Aspectos históricos da simetria e da teoria de grupos. Simetria na arte e no cotidiano. 2) Conformação e configuração. Compostos com um centro de quiralidade. Compostos com dois ou mais centros de quiralidade. Quiralidade axial. Quiralidade planar. Configuração relativa e absoluta. 3) Polarimetria e rotação ótica, dicroísmo circular. Consequências gerais em espectroscopia eletrônica. 4) Dessimetrização.

<b>Programa</b>
<ul style="list-style-type: none"><li>- Histórico da teoria de grupos e do conceito de simetria na química.</li><li>- Simetria em obras de arte e em objetos do cotidiano.</li><li>- Estereoquímica molecular: conformação e configuração.</li><li>- Quiralidade molecular: compostos com um ou mais centros de quiralidade. Quiralidade axial. Quiralidade planar.</li><li>- Configuração relativa e absoluta.</li><li>- Quiralidade e técnicas experimentais: polarimetria, rotação ótica e dicroísmo circular.</li><li>- Simetria e espectroscopia: consequências gerais e aplicações em espectroscopia eletrônica.</li><li>- Dessimetrização.</li></ul>

<b>Bibliografia</b>
<ol style="list-style-type: none"><li>1. Constantino, M. G. "Química Orgânica – Curso Básico Universitário – Vol. 2", 1ª edição, LTC, Rio de Janeiro, 2008.</li><li>2. Mislow, K. "Introduction to stereochemistry", 1ª Edição, W. A. Benjamin, Inc., New York, 1966.</li><li>3. Hargittai, M.; Hargittai, I. "Symmetry through the eyes of a chemist", 3ª Edição, Springer, Dordrecht, 2009.</li><li>4. Kettle, S.F.A. "Symmetry and structure: readable group theory for chemists", 2ª Edição, John Wiley &amp; Sons, Chichester, 1995.</li><li>5. Textos selecionados pelos docentes</li></ol>

**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
QI949	Catálise e sociedade - Novos processos catalíticos para a conversão direta de metano e CO <sub>2</sub> em produtos

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	QG-108
---------	--------

Docente	Daniela Zanchet
---------	-----------------

Ementa
O papel da Catálise na solução dos problemas do século XXI. Fundamentos da catálise heterogênea. Catalisadores sólidos, estratégias de síntese e sítios catalíticos. Conversão de metano e CO <sub>2</sub> em produtos. Desafios e oportunidades.

Programa
Catálise, histórico e definições Papel do metano (gás natural) e do CO <sub>2</sub> nos desafios energéticos e ambientais da atualidade Catálise heterogênea: aspectos fundamentais, catalisadores sólidos, sítios catalíticos Estratégias de síntese e caracterização no desenvolvimento de novos catalisadores a base de metais de transição Ativação de ligações C-H, C-O, H-H por metais Conversão de metano em produtos: conversão direta a metanol ou via gás de síntese Conversão de CO <sub>2</sub> em produtos: metanol e álcoois superiores.

Bibliografia
A ser fornecida pelo professor

Critérios de Avaliação
Critérios de avaliação definidos pelo Professor, com base no disposto na Seção I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliação do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduação. Frequência: 75 % (* O abono de faltas será considerado dentro do previsto no capítulo VI, seção X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduação)



Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QO857	Introdução à Química Verde

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	AA450
---------	-------

Docente	Julio Cezar Pastre
---------	--------------------

Ementa
Sustentabilidade. Histórico da Química Verde. Princípios e Métricas. Matérias-Primas Renováveis. Solventes Verdes. Noções de Catálise. Prevenção de Resíduos e Diminuição dos Riscos. Exemplos da aplicação da Química Verde.

Programa
<ol style="list-style-type: none"><li>1. Sustentabilidade</li><li>2. Introdução histórica e definição de Química Verde</li><li>3. Os doze princípios da Química Verde:<ol style="list-style-type: none"><li>3.1. Prevenção;</li><li>3.2. Eficiência Atômica;</li><li>3.3. Sínteses seguras;</li><li>3.4. Desenvolvimento de produtos seguros;</li><li>3.5. Uso de solventes e auxiliares seguros;</li><li>3.6. Busca pela eficiência energética;</li><li>3.7. Uso de matérias-primas obtidas de fontes renováveis;</li><li>3.8. Evitar a formação de derivados;</li><li>3.9. Catálise;</li><li>3.10. Produtos degradáveis;</li><li>3.11. Análise em tempo real para a prevenção da poluição;</li><li>3.12. Química segura para a prevenção de acidentes.</li></ol></li><li>4. Métricas e análise do ciclo de vida</li><li>5. Exemplos de química/tecnologia auto-sustentável que foram desenvolvidos abrangendo as áreas da Química incluindo a Química Orgânica, Inorgânica, Analítica, Físico-Química, Química Industrial, Química de polímeros, Química Ambiental e Bioquímica.</li></ol>

### **Bibliografia**

Anastas, P.T., Warner, J.C., Green Chemistry: Theory and Practice, Oxford University Press, New York, 1998.

[2] Lancaster, M., Green Chemistry: an introductory text, Cambridge, Royal Society of Chemistry, 2002

[3] Kirchhoff, M.M., Promoting sustainability through green chemistry. Resources, Conservation and Recycling, 44, 237, 2005.

[4] Corrêa, A.G., Zuin, V.G. (organizadoras), Química Verde: Fundamentos e Aplicações, São Carlos; Ed. da UFSCar, 2009.

[5] Silva, F.M.; Lacerda, P.S.B., Jones Jr., J. Desenvolvimento sustentável e Química Verde. Química Nova, 28, 103, 2005.

[6] Lenardão, E.J., Freitag, R.A., Dabdoub, M.J., Batista, A.C.F., Silveira, C.C., "Green Chemistry" – Os 12 princípios da Química Verde e sua inserção nas atividades de ensino e pesquisa, Química Nova, 26, 123, 2003.

[7] Erin M. Gross, E. M., Green Chemistry and Sustainability: An Undergraduate Course for Science and Nonscience Majors, J. Chem. Educ., 90, 429, 2013.

### **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
QO929	Química dos compostos heterocíclicos: Uma Introdução

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

Pré-Req	QO521
---------	-------

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

Ementa
Estrutura, reatividade, preparo e utilização de heterociclos em Química Orgânica e Medicinal.

Programa
Estrutura, reatividade e aplicações de heterociclos de três membros (epóxidos, aziridinas); de quatro membros (azetidina, oxetana); de cinco membros (pirrolidinas, imidazóis, pirróis, furano, tiofeno); de seis membros (piridinas, pirazinas, pirimidinas); de bicícos (indóis, benzofurano, quinolinas, quinoxalinas). Utilização dos compostos estudados na síntese de catalisadores. Utilização dos compostos estudados na síntese de fármacos.

Bibliografia
a) Theophil Eicher, Siegfried Hauptmann e Andreas Speicher, "The Chemistry of Heterocycles: Structures, Reactions, Synthesis, and Applications" Terceira edição, 2013, Wiley-VCH. b) J. A. Joule e K. Mills, "Heterocyclic Chemistry", Quinta edição, 2010, Wiley-Blackwell c) Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S.; Wothers, P. "Organic Chemistry", 2004; Oxford Univ. Press: Oxford. c) Artigos fornecidos pelo docente

Crítérios de Avaliação
Crítérios de avaliação definidos pelo Professor, com base no disposto na Seção I – Normas Gerais, Capítulo V – Da Avaliação do Aluno na Disciplina, do Regimento Geral de Graduação. Frequência: 75 % (* O abono de faltas será considerado dentro do previsto no capítulo VI, seção X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduação)