

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA
PÓS-GRADUAÇÃO

DISCIPLINAS OFERECIDAS NO 2º SEMESTRE/2016

ATENÇÃO: A MATRÍCULA EM DISCIPLINAS PARA ALUNOS REGULARES SERÁ DE 04 a 20 DE JULHO/2016

INÍCIO DO SEMESTRE: 01 de agosto de 2016
TÉRMINO DO SEMESTRE: 07 de dezembro de 2016

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

QP124 Turma "A" Terça e Quinta 14h às 16h Sala IQ-13	Introdução à Química Quântica e Espectroscopia	Créditos: 04 VAGAS: Mínimo: 02 Máximo: 30
	Ementa: Ondas de matéria em sistemas simples. Partículas em campos de potencial variável, transições. Estrutura de átomos. A ligação química de moléculas simples. Moléculas diatômicas. Bibliografia: Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry by Linus Pauling and E. Bright Wilson Jr. Quantum Chemistry by Henry Eyring, John Walter, and George Kimball Physical Chemistry: A Molecular Approach by Donald A. McQuarrie and John D. Simon 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 Molecular Vibrations: The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra by Edgar Bright Wilson, J.C. Decius, and Paul C. Cross	

QP144 Turma "A" Quarta e Sexta 14h às 16h Sala IQ-07 (H-102)	<p>Fundamentos da Química Inorgânica Estrutural</p> <p>Prof. Dr. Fernando Aparecido Sigoli</p> <p>Ementa: 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>Bibliografia:</p> <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. Wiley & 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>1. Artigos selecionados.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: Mínimo: 04 Máximo: 20</p>
QP222 Turma "A" Terça e Quinta 10h às 12h Sala IQ-05	<p>Métodos Físicos em Química Orgânica</p> <p>Prof. Dr. Roberto Rittner Neto</p> <p>Ementa: Introdução, Espectroscopia de Infravermelho, Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear, Exercícios Combinados Envolvendo as duas Técnicas.</p> <p>Bibliografia:</p> <p>1. Silverstein R.M., Webster F.X., Kiemle D.J., Bryce D.L., "Spectrometric Identification of Organic Compounds", Wiley, Hoboken, NJ, 8th Edn, 2014. Existem várias edições em português.</p> <p>2. Hesse M., Meier H., Zeeh B., "Spectroscopy Methods in Organic Chemistry", G. Thieme, New York, 2th Edn., 2007.</p> <p>3. Pavia, D.L., Lampman G.M., Kriz Jr. G.S., Vyvyan J.A., "Introdução à Espectroscopia", Cengage, São Paulo, 2010.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: Mínimo: 05 Máximo: 20</p>
QP226 Turma "I" Segunda e Quarta 19h às 21h Sala IQ-17 (E-312)	<p>Tópicos Especiais em Química Analítica VI "Tópicos em Quimiometria"</p> <p><u>ESSA DISCIPLINA TERÁ INÍCIO NO DIA 01 DE AGOSTO E FIM PREVISTO PARA 28 DE SETEMBRO DE 2016</u></p> <p>Prof. Dr. Ronei Jesus Poppi (coordenador), Profa. Dra. Márcia Cristina Breitkreitz, Prof. Dr. Douglas Rutledge (AgroParisTech, França)</p> <p>Ementa</p> <p>Planejamento Experimental, Análise de Componentes Principais (PCA), Regressão em Componentes Principais (PCR), Regressão em Mínimos Quadrados Parciais (PLS), Resolução Multivariada de Curvas (MCR), Análise de Componentes Independentes (ICA) e Common components analysis (CCA). Teoria e aplicações de cada método. O curso será dividido em aulas teóricas e práticas no ambiente computacional Matlab</p> <p>Bibliografia</p> <ul style="list-style-type: none"> - R., E. Bruns, I. S. Scarminio, B. de Barros Neto, Como fazer experimentos: aplicações na ciência e na indústria, 4^a ed., Bookman, SP, 2010. - G. E. P. Box, J. S. Hunter, W. G. Hunter, Statistics for Experimenters, John Wiley and Sons, New Jersey, 2005. - D. L. Massart, B. G. M. Vandeginste, L. M. C. Buydens, S. de Jong, P. J. Lewi, J. Smeyers-Verbeke, Handbook of Chemometrics and Qualimetrics: Part B, Elsevier, Amsterdam, 1998. - R. G. Brereton, Chemometrics – Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant, Wiley, Chichester, 2003. - M. Otto, Chemometrics - Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry, Wiley-VCH, Weinheim, 1999. 	<p>Créditos: 02</p> <p>VAGAS: Mínimo: 05 Máximo: 40</p>

	<ul style="list-style-type: none"> - H. Martens e T. Naes, "Multivariate Calibration", Wiley, New York, 1991. - D. Juan-Rimbaud Bouveresse, D. N. Rutledge, Independent Components Analysis with the Jade Algorithm, TrAC. (2013) 50, 22–32 - D. Jouan-Rimbaud Bouveresse, A. Moya-González, F. Ammari, D.N. Rutledge, Two novel methods for the determination of the number of components in independent components analysis models Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems (2012) 112, 24–32. 	
QP227 Turma "A" Terça das 14 às 16h e Quinta das 10h às 12h Sala E-312 (IQ17)	<p>Fundamentos de Química Analítica</p> <p>Profas. Dras. Susanne Rath (Coordenadora), Ana Valéria Colnaghi Simionato Cantú, Anne-Hélène Fostier, Alessandra Sussulini, Cassiana Carolina Montagner Raimundo.</p> <p>Ementa Equilíbrio químico. Íons em Solução. Teoria de titulações. Seleção de métodos analíticos. Estatística aplicada à Química Analítica</p> <p>Bibliografia</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Vitz E. Redox Redux: Recommendation for improving textbook and IUPAC definitions. Journal of Chemical Education, 2002, 79(3):397-400. 2. Barnum DW. Potential-pH diagrams. Journal of Chemical Education, 1982, 59(10):809-812. 3. Skoog DA, West DM, Holler FJ, Crouch SR. Fundamentos de Química Analítica. Trad. M.Grassi; São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2006. 4. Stumm W, Morgan JJ. Aquatic chemistry. 3rd ed.; Wiley Interscience Pub.; 1996. 5. Butler JN. Ionic equilibrium: solubility and pH calculations. Wiley Interscience Pub.; 1998. 6. Butler, J.N., Ionic Equilibrium: A Mathematical Approach, AddisonWesley Publish Company, Menlo Park, 1964. 7. Miller, J.C. e Miller, J. N., * *Statistics for Analytical Chemistry, Ellis Horwood, New York, Prentice Hall, 1993. 8. Harris, DC, Análise Química Quantitativa. Rio de Janeiro: LTC Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2008. 9. Wänninen EV, Ingman F. Metal buffers in chemical-analysis .1. Theoretical considerations. Pure and Applied Chemistry, 1987, 59(12): 1681-1692. 10. Hulanicki A, Ingman F, Wänninen EV. Metal buffers in chemicalanalysis .1. Practical considerations Pure and Applied Chemistry, 1991, 63(4): 639-642. 	Créditos: 04 VAGAS: Mínimo: 05 Máximo: 20
QP268 Turma "A" Segunda 19h às 21h e Quarta das 21h às 23h Sala IQ-03	<p>Planejamento e Otimização de Experimentos</p> <p>Prof. Dr. Roy Edward Bruns</p> <p>Ementa: Porque métodos univariados (convencionais) de otimização não funcionam? As vantagens de usar métodos multivariados. Como o número de ensaios pode ser minimizado com planejamentos multivariados e ainda obter resultados mais precisos do que aqueles provenientes de métodos univariados. Planejamentos fatoriais com dois níveis para aplicações no laboratório e planta piloto. Análise de dados e interpretação de resultados. Planejamentos adequados para obter superfícies de resposta. A otimização simultânea de várias propriedades de um produto. Análise de dados e interpretação de resultados. Aplicações para mistura. Planejamentos fatoriais fracionários para fazer triagem de fatores. Análise de dados e interpretação de resultados. Treinamento na utilização de programas computacionais que executam cálculos de resultados de fatoriais completos, fatoriais fracionários e planejamentos para análise de superfície de resposta. (Programas de domínio público).</p> <p>Bibliografia: B de Barros Neto, I.S. Scarminio e R.E. Bruns, Editora Unicamp, 2001.</p>	Créditos: 04 VAGAS: Mínimo: 05 Máximo: 100
QP313 Turma "A" Terça 16h às 18h e Quinta 14h às 16h	<p>Métodos Espectroquímicos de Análise</p> <p>Profs. Drs. Ronei Jesus Poppi (coordenador), Solange Cadore, Adriana Vitorino Rossi</p> <p>Ementa Métodos baseados na absorção, emissão e espalhamento da radiação eletromagnética. Sensores óticos</p>	Créditos: 04 VAGAS: Mínimo: 05 Máximo: 25

Sala E-312 (IQ17)	<p>Bibliografia</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Skoog, D.A.; Holler, F.J. and Nieman, T.A.; Principles of Instrumental Analysis, 5th edition, Saunders College Publishing, 1998. 2. Spectrophotometry, luminescence and colour; Science and Compliance Analytical Spectroscopy Library, volume 6, Elsevier, Amsterdam, 1995. 3. Perkampus, H-H.; UV-VIS spectroscopy and its applications, Springer, 1992. 4. Valeur, B.; Molecular Fluorescence, Wiley-VCH, Weinheim, 2002. 5. Rendell, D.; Fluorescence and phosphorescence spectroscopy. John Wiley, New York, 1987. 6. 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. 7. Welz, B. and Sperling, M. Atomic Absorption Spectrometry, 3rd ed., Wiley - VCH, Weinheim, 1999. 8. J. Dedina and D. L. Tsalev, Hydride Generation Atomic Absorption Spectrometry, Wiley, Chichester, 1995. 9. A. Montaser and D.W. Golightly (editores), Inductively Coupled Plasmas in Analytical Atomic Spectrometry, 2nd ed., Wiley - VCH, Weinheim, 1992. 10. P. W. J. M. Boumans (editor), Inductively Coupled Plasma Emission Spectroscopy, Vols 1, 2, John Wiley, New York, 1987. 11. J. S. Becker, Inorganic Mass Spectrometry, Wiley, Weinheim, 2007 	
QP327 Turma "A" Segunda e Quarta 16h às 18h Sala E-312 (IQ-17)	<p>Interpretação e Atribuição de Espectros de RMN 1D e 2D</p> <p>Prof. Dr. Cláudio Francisco Tormena</p> <p>Ementa RMN de 1H, 13C e outros núcleos: deslocamento químico, constantes de acoplamento, efeitos isotópicos, espectros de RMN 2D homo- e hetero-nucleares, interpretação de espectros.</p> <p>Bibliografia</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. J. H. Simpson, Organic Structure Determination using 2D NMR spectroscopy; Elsevier, 2008. 2. T. D. W. Claridge, High-resolution NMR techniques in organic chemistry; 2nd edition; Elsevier, 2009. 3. J. Keeler, Understanding NMR spectroscopy, 2nd edition; Wiley, 2010. 	Créditos: 04 VAGAS: Mínimo: 05 Máximo: 20
QP427 Turma "I" Segunda, Quarta e Sexta 17h às 19h Sala IQ-07	<p>Tópicos Especiais em Química Orgânica V "Técnicas de Polimerização Radicalar Controlada"</p> <p><u>ESSA DISCIPLINA TERÁ INÍCIO NO DIA 01 DE AGOSTO E FIM PREVISTO PARA 15 DE SETEMBRO DE 2016, POR ISSO SERÁ MINISTRADA TRÊS VEZES POR SEMANA: SEGUNDAS, QUARTAS E SEXTAS.</u></p> <p>Prof. Dr. Cesar Liberato Petzhold (IQ-UFRGS)</p> <p>Ementa: Princípios básicos da polimerização radicalar controlada. Polimerização Radicalar mediada por Nitróxido (NMP); Polimerização Radicalar por Transferência de Átomo (ATRP); Processo de Transferência de Cadeia por Adição-Fragmentação Reversível (RAFT): Fundamentos, Mecanismo e cinética de polimerização, Limitações e Aplicações. Engenharia Macromolecular através da Polimetização Radicalar Controlada: Polímeros funcionalizados, Macromonômeros, Copolímeros, Polímeros estrela, Polímeros dendríticos e hiperramificados, Polímeros reticulados. Futuro e perspectivas da Polimerização Radicalar Controlada.</p> <p>Bibliografia</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Handbook of Radical Polymerization, Matyjaszewski, K., Davis, T.P., John Wiley & Sons, Inc., 2002. 2. Macromolecular Engineering: Precise Synthesis, Materials Properties, Applications, Matyjaszewski, K., Gnanou, Y., Leibler, L.(eds.), Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA 2007. 3. Handbook of RAFT Polymerization, Barner-Kowollik, C. (Ed.), Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA 2008. 4. Fundamentals of Controlled/Living Radical Polymerization. Editor(s): Tsarevsky N. V., Sumerlin B.S., RSC, 2013. 	Créditos: 02 VAGAS: Mínimo: 05 Máximo: 20

	<p>5. Controlled/living radical polymerization: Features, developments, and perspectives, W. Braunecker A., Matyjaszewski K, Prog. Polym. Sci. 32, 93–146(2007).</p> <p>6. Controlled Radical Polymerization: Mechanisms Editor(s): K. Matyjaszewski, B. S. Sumerlin, N. V. Tsarevsky, J. Chiefari, ACS Symposium Series 1187, American Chemical Society, 2015.</p> <p>7. Artigos recentes sobre polimerização radicalar controlada, exemplo: Iron-catalyzed atom transfer radical polymerization Xue, Zhigang; He, Dan; Xie, Xiaolin, POLYMER CHEMISTRY, 6(10) 1660-1687, 2015; Modeling and theoretical development in controlled radical polymerization, Mastan, Erlita; Li, Xiaohui; Zhu, Shiping, PROGRESS IN POLYMER SCIENCE 45, 71-101(2015);</p>	
QP433 Turma "I" Segunda 19h às 21h Sala: IQ-16 e Quarta 21h às 23h Sala: IQ-05	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química I “Introdução à programação de microcontroladores”</p> <p>Prof. Dr. Pedro Antonio Muniz Vazquez</p> <p>Maiores detalhes ou em caso de qualquer dúvida contactar o professor em <vazquez@g.unicamp.br></p> <p>Ementa: Arquiteturas de computadores. Microprocessadores de uso geral. Microprocessadores de controle e aquisição de dados. Microcontroladores PIC. Microcontroladores AVR. Linguagens de Programação. Protocolos de comunicação. Medida e aquisição de dados (grandezas elétricas, pressão, temperatura, espectros, etc). Controle de dispositivos e instrumentos (grandezas elétricas, velocidade, posição, motores, relés, válvulas, etc). Exemplos e aplicações. Projetos. O curso será desenvolvido com aulas teóricas e práticas usando microcontroladores PIC 12F683, 16F628A, 16F877A e 18F4550 e placas Arduino Uno e Mega na sala de PC da pós-graduação. A avaliação consistirá da realização de um projeto proposto a ser realizado em grupo.</p> <p>Bibliografia</p> <ul style="list-style-type: none"> -Interfacing PIC Microcontrollers to Peripheral Devices, Bodan Borowik, Springer, 2011 - Beginning Arduino, Michael McRoberts, Apres, 2010 - Interfacing microcomputers to the real world, Murray Sargent, R.L. Shoemaker, Addison-Wesley, 1981 -https://www.arduino.cc/en/Guide/HomePage (acessado em 10/05/2016) -http://www.microchip.com/design-centers/8-bit (acessado em 10/05/2016) 	Créditos: 04 VAGAS: Mínimo: 02 Máximo: 12
QP434 Turma "I" Terça 19h às 21h Sala IQ-10	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química II “Tamanho de potencial zeta de micro e nanopartículas”</p> <p>Prof. Dr. Francisco Benedito Teixeira Pessine</p> <p>Ementa: Tamanho, potencial zeta, espectroscopia de correlação de fôtons</p> <p>Bibliografia: Artigos de literatura a serem indicados pelo professor aos alunos.</p>	Créditos: 02 VAGAS: Mínimo: 05 Máximo: 20
QP435 Turma "I" Segunda 19h às 21h Sala IQ-05	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química III “Introdução à análise térmica e dinâmica de materiais”</p> <p>Profa. Dra. Maria Isabel Felisberti</p> <p>Ementa: Introdução às técnicas térmicas e mecânicas de caracterização de materiais de maior relevância na atualidade.</p> <p>Bibliografia</p> <p>Introduction to Thermal Analysis: techniques and applications, Michael E. Brown, Chapman and Hall, London, 1988.</p> <p>Thermal Characterization of Polymeric Materials, Edith A. Turi, Academic Press, New York, 1981.</p> <p>Principles and applications of Thermal Analysis, Paul Gabbott, Blackwell Pub, Oxford, 2008.</p>	Créditos: 02 VAGAS: Mínimo: 02 Máximo: 20

	<p>Thermal Analysis, Wesley Wendlandt, John Wiley, Chichester, 1986. Thermal Analysis of polymers, D. Menczel, R. Bruce Prime, John Wiley, Hoboken, 2009.</p>	
QP446 Turma "I" Segunda 10h ás 12h Sala IQ-13	<p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica IV "Interação de nanomateriais com biossistemas: desafios e oportunidades"</p> <p>Prof. Dr. Oswaldo Luiz Alves</p> <p>Ementa Introdução aos nanomateriais. Interação de nanomateriais com biossistemas: principais problemas e soluções. Efeitos de agração: efeito corona. A emergência da Nanotoxicologia. Exemplos de estudos e casos: ciências da vida e meio ambiente;</p> <p>Bibliografia N. Duran, S.S. Guterres, O.L. Alves, "Nanotoxicology – Materials, Methodologies and Assessments", Springer, 2015.</p>	Créditos: 02 VAGAS: Mínimo: 02 Máximo: 12
QP447 Turma "I" Terça 19h ás 21h Sala IQ-07	<p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica V "Química Bioinorgânica"</p> <p>Prof. Dr. Pedro Paulo Corbi</p> <p>Ementa: Conceitos e definições clássicas de compostos de coordenação e bioinorgânica. Aspectos fisiológicos e patológicos relacionados aos íons metálicos em sistemas biológicos 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 e prata em medicina: planejamento, síntese e aplicações.</p> <p>Bibliografia</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. J. E. Huheey, E. A. Keiter, R. L. Keiter, Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity, 4a Ed., Harper Collins, 1993. 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. 3. H.-B. Kraatz, N. Metzler-Nolte (Eds.), Concepts and Models in Bioinorganic Chemistry. Wiley-VCH, Weinheim, 2006. 4. B. K. Keppler, Metal complexes in cancer chemotherapy. Weinheim. VCH Verlagsgesellschaft, 1993. 5. H. Sigel (Ed.) Metal Ions in Biological Systems – biological action of metal ions (vol.6). Marcel Dekker, New York, 1976. 6. S. J. Lippard, J. M. Berg. Principles of Bioinorganic Chemistry. Mill Valley: Univ. Science Books, 1994. 7. R. Bakhtiar, E.I. Ochiai, Pharmacological applications of inorganic complexes. General Pharmacology, 32, 525-540, 1999. 8. N. Farrell, Biomedical uses and applications of inorganic chemistry. An overview. Coordination Chemistry Reviews, 232, 1- 4, 2002. <p>Critérios de avaliação:</p> <p>Seminários: temas a serem entregues aos alunos com no mínimo uma aula de antecedência. Nota de zero a dez Provas: uma prova escrita ao final do curso. Nota de zero a dez.</p> <p>Média final: (nota da prova + média dos seminários) / 2</p>	Créditos: 02 VAGAS: Mínimo: 05 Máximo: 15
QP648 Turma "I" Terça 10h ás 12h Sala IQ-07	<p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica VI " Nanomateriais e nanoestruturas para conversão e armazenamento de energia"</p> <p>Profa. Dra. Ana Flávia Nogueira</p> <p>Ementa: Propriedades gerais dos nanomateriais e nanoestruturas. Revisão de física de semicondutores. Estrutura de bandas ou níveis de energia? Confinamento quântico. Fotofísica das nanopartículas em solução e filme. Teorias de transporte de portadores de carga. Nanomateriais e nanoestruturas em fotocatálise para degradação de compostos orgânicos e produção de solar fuels (redução de CO₂ e water splitting), conversão de energia solar em eletricidade (células solares</p>	Créditos: 02 VAGAS: Mínimo: 05 Máximo: 20

	<p>orgânicas, TiO₂/corante e perovskita), quantum dots inorgânicos em LEDs. Baterias de íons lítio e capacitores.</p> <p>Bibliografia</p> <p>1- Wilson, M., Kannangara, K., Raguse, B., Simmon, M. (2002) Nanotechnology: Basic Science and Emerging Technologies, Chapman and Hall/CRC 2- Garcia-Martinez, J. (2010) Nanotechnology for the Energy Challenge, Wiley-VCH 3- Somorjai, G.A., Frei, H., Park, J.Y. Advancing the frontiers in nanocatalysis, biointerfaces and renewable energy conversion by innovations of surface techniques, J. Am. Chem. Soc., 2009, 131, 16589. 4- Kamat, P.V. Meeting the clean energy demand. Nanostructure architectures for solar energy conversion, J. Phys. Chem. C, 2007, 111, 2834.</p>	
QP812 Turma: "I" Segunda 16h às 18h Sala: IQ-03	<p>Tópicos Especiais em Química Analítica VIII "Planejamento e Otimização Experimental aplicados ao desenvolvimento farmacêutico"</p> <p>Profa. Dra. Márcia Cristina Breitkreitz</p> <p>Ementa: Introdução: Por que utilizar métodos multivariados? O guia ICH Q8 e os conceitos de Qualityby Design e Design Space; apresentação do relatório exemplo do FDA para QbD.</p> <p>Planejamento fatorial em dois níveis: como montar o planejamento, cálculo dos efeitos dos fatores, conceito de interação entre variáveis; erros e intervalos de confiança; construção do modelo estatístico; gráfico de probabilidade Normal; análise da variância (ANOVA), ferramentas de diagnóstico, construção e interpretação da superfície de resposta; avaliação da curvatura.</p> <p>Planejamento fatorial fracionário para triagem de fatores: como selecionar os experimentos, relação geradora, frações; resolução; como selecionar um fracionário sem perder informações; como completar o planejamento fracionário.</p> <p>Planejamento composto central (3 níveis): construção e avaliação do modelo quadrático; construção, avaliação e deslocamentos na superfície de resposta.</p> <p>Utilização do modelo para previsão das propriedades de interesse: como encontrar as condições experimentais que levem a um determinado valor da resposta (valor alvo); maximização e minimização de respostas; definição do Design Space e utilização do modelo para deformulação.</p> <p>Otimização simultânea de mais de uma resposta: sobreposição de mapas de contorno e procedimento baseado nas funções de Derringer e Suich.</p> <p>Planejamentos de mistura: porque existem métodos diferentes para otimização de misturas, conceitos importantes, representação do domínio experimental e os modelos de misturas.</p> <p>Bibliografia</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Bruns, R. E., Scarminio, I., S., de Barros Neto, B. Como fazer experimentos: aplicações na ciência e na indústria, 4^a ed., Bookman, SP, 2010. 2. Box, G. E. P., Hunter, W. G. Statistics for Experimenters, John Wiley and Sons, New Jersey, 2005. 3. Draper, N. e Smith. H. Applied Regression Analysis, 3rd ed., Wiley, EUA, 1998. 4. Cornell, John A. Experiments with mixtures: designs, models and the analysis of mixture data, 3rd ed., Wiley, 2002. 5. Miller, J. C. e Miller, J. N. Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry, 6th ed., Pearson, England, 2010. 	<p>Créditos: 02</p> <p>VAGAS: Mínimo: 05 Máximo: 30</p>