
QA 915 - A QUÍMICA ANALÍTICA CONTEMPORÂNEA: Avanços e Tendências.**Prof. Fábio Augusto****2º Semestre de 2013**

Pré-Requisito: QA416 ou QA682

Ementa:

Seminários ministrados por docentes e pesquisadores da área de Química Analítica, versando sobre o estado-da-arte da Química Analítica, aplicações e tendências.

Bibliografia:

A ser fornecido pelo professor.

QA 919 - FUNDAMENTOS DE ESPECTROFOTOMETRIA NIR E VALIDAÇÃO DE MÉTODOS CROMATOGRÁFICOS PARA ANÁLISE DE FÁRMACOS.**Prof. Jarbas J. R. Rohwedder e Profa. Susanne Rath****2º Semestre de 2013**

Pré-Requisito: QA582 e QA682

Ementa:

Fundamentos da espectroscopia. Espectroscopia Vibracional. Aspectos Históricos. Osciladores harmônicos e anarmônicos. Instrumentos técnicas de medidas espectrais no infravermelho próximo. Espectros de transmitância, absorbância e reflectância difusa. Análise (qualitativa e quantitativa) e interpretação de espectros NIR. A necessidade de técnicas multivariadas para tratamento de dados NIR. Exemplos de uso da espectroscopia NIR na indústria com ênfase para a indústria de Fármacos.

Otimização de métodos cromatográficos. Parâmetros de conformidade. Validação de métodos cromatográficos voltado à análise de Fármacos. Monografias farmacopêicas. Aspectos de legislação. Tratamento estatístico de dados e representação de resultados. Cálculos de incerteza.

Bibliografia:

1. Phil Williams and Karl Norris, Near-Infrared Technology in the Agricultural and Food Industries, 2nd ed., AACC Inc, St. Paul, MI, 2001.
2. C. Pasquini, Near Infrared Spectroscopy: Fundamentals, Practical Aspects and Analytical Applications, J. Braz. Chem. Soc., 14, 198-219 (2003).
3. INMETRO, Orientações sobre Validação de Métodos e Ensaio Químicos, 2003.
4. INTERNATIONAL CONFERENCE ON HARMONIZATION, Q2A-Validation of Analytical Procedures: Definitions and Terminology, 1995.
5. UNITED STATES FOOD AND DRUG ADMINISTRATION, Guidance for Industry, Bioanalytical Method Validation. 2001.
6. MINISTÉRIO DA AGRICULTURA, PECUÁRIA E ABASTECIMENTO - Guia para Validação de Métodos Analíticos e Controle de Qualidade Interna das Análises de Monitoramento do Plano Nacional de Resíduos e Contaminantes - PNCRC ANIMAL.
7. Miller J.C. and Miller J.N., Statistics for Analytical Chemistry. Ellis Horwood, 3d ed. 1993.

QF 930 - ÁGUA: ESTRUTURA, PROPRIEDADES, USOS E ESTRATÉGIAS.

Prof. Fernando Galembeck

2º Semestre de 2013

Pré-Requisito: QF431

Ementa:

Água no Universo. Água na Terra. Estrutura da água. Fases. Soluções. Molhamento e molhabilidade. Água no ambiente. Água e energia. Controvérsias. A política da água.

Bibliografia:

Phillip Ball, "H2O: a biography"; Blog de Philip Ball: <http://waterinbiology.blogspot.com/>;

Franks, F (Ed), Water, A comprehensive treatise, Plenum Press, New York, 1972-1982;
<http://en.wikipedia.org/wiki/Wat>

QF 935 - INTRODUÇÃO À MODELAGEM MOLECULAR.

Prof. Nelson Henrique Morgon

2º Semestre de 2013

Pré-Requisito: N.T.

Ementa:

Apresentação de Tópicos Relacionados aos Principais Métodos Teóricos e às Técnicas Computacionais de Cálculos e de Visualização.

Bibliografia:

Artigos Científicos e outros textos fornecidos ao longo da disciplina.

QF 936 - VIDA E OBRA DE GRANDES FÍSICO-QUÍMICOS.

Prof. Edvaldo Sabadini

2º Semestre de 2013

Pré-Requisito: N.T.

Ementa:

Serão apresentadas palestras sobre a vida e a obra de grandes cientistas que contribuíram para o desenvolvimento da Físico-Química.

Bibliografia:

Será fornecida ao longo da disciplina.

QF 939 - CRISTALOGRAFIA DE PROTEÍNAS.**Prof. Ricardo Aparício****2º Semestre de 2013**

Pré-Requisito: N.T.

Ementa:

Aspectos práticos e teóricos da Cristalografia de Proteínas. A estrutura protéica e obtenção da proteína. Cristalização, coleta e processamento de dados de difração. Pacotes computacionais. O aparato experimental, fontes de Raios X e Luz Síncrotron. Obtendo os mapas de densidade eletrônica: Substituição Molecular e derivados de átomos pesados. Construção e refinamento do modelo atômico. Validação e deposição de estruturas.

Bibliografia:

International Tables for Crystallography Volume F Crystallography of Biological Macromolecules Series: International Tables for Crystallography, Vol. F Rossmann, M.G.; Arnold, E. (Eds.) 2001, 832 p., Hardcover ISBN: 0-7923-6857-6.

Protein Crystallography (Molecular Biology Series) by T. L. Blundell, Lewis Johnson Hardcover: 565 pages Publisher: Academic Press (January 28, 1976) ISBN: 0121083500.

QI 940 - INTRODUÇÃO À NANOTECNOLOGIA.**Prof. Oswaldo Luiz Alves****2º Semestre de 2013**

Pré-Requisito: QI245 e QI345

Ementa:

1. A questão do tamanho e o impacto sobre as propriedades.
2. Nanotecnologia e a convergência científico-tecnológica.
3. Bases científicas da Nanotecnologia.
4. Aplicações/produtos de sistemas nanotecnológicos.
5. Alguns exemplos emblemáticos : novas estruturas de carbono e nanopartículas metálicas.
6. Estratégias de síntese de nanomateriais.
7. Riscos e Benefícios da Nanotecnologia. A nanotecnologia no Brasil.

Bibliografia:

1. Material que será fornecido pelo professor apoiado no site: <http://lqes.iqm.unicamp.br>
2. O.L. Alves, " Cartilha sobre Nanotecnologia", 2a. Edição , Brasília, 2010.

QI 944 - DEGRADAÇÃO E ESTABILIZAÇÃO DE POLÍMEROS.

Prof. Marco Aurélio De Paoli

2º Semestre de 2013

Pré-Requisito: QO421

Ementa:

- 1- Conceitos básicos sobre polímeros relacionados com a degradação.**
- 2- Tipos de reações de degradação.**
- 3- Formas independentes de iniciação das reações de degradação.**
- 4- Formas associadas de iniciação das reações de degradação.**
- 5- A degradação em sistemas poliméricos multicomponentes: blendas e compósitos.**
- 6- Ensaio e métodos de acompanhamento dos processos de degradação.**
- 7- Estabilizantes e anti-oxidantes.**
- 8- Fotoestabilizantes e outros aditivos estabilizantes.**

Bibliografia:

Marco-Aurelio De Paoli, "Degradação e Estabilização de Polímeros", Editora Artliber, 2009.

QI 946 - FUNDAMENTOS E APLICAÇÕES DE MATERIAIS LUMINESCENTES.

Prof. Fernando Aparecido Sígoli

2º Semestre de 2013

Pré-Requisito: QI345

Ementa:

Princípios fundamentais sobre excitação, emissão e regras de seleção; retorno ao estado fundamental: processos radiativos e não radiativos; mecanismos de transferência de energia; conversão ascendente de energia; aplicações de dispositivos luminescentes.

Bibliografia:

- 1. Blasse, G., Grabmaier, B. C. Luminescent materials. Berlin: Springer-Verlag, 1994.**
- 2. Lakovicks J.R., Principles of fluorescence spectroscopy, 2nd ed., Kluwer academic, New York, 1999.**
- 3. Kitai, A. H., Luminescent materials and applications - Wiley Series in Materials for Electronic & Optoelectronic Applications 2008.**
- 4. Nalwa, H.S., Rohwer, L.S., Handbook of luminescence, display materials, and devices. American Scientific Publishers, 2003.**

Pré-Requisito: QO421 ou QO423

Ementa:

Principais tipos de ionização e de espectros de massas, ionização por elétrons, ionização por eletrospray. Espectros MS e MSn. Principais rotas de fragmentação: clivagem sigma, alpha, beta, rearranjos de hidrogênio, regra do nitrogênio, regra do eletrão-par, padrões de isotopólogos, massas exatas, defeitos de massa, perdas de moléculas neutras e radicais. Perdas lógicas e ilógicas. Principais íons e principais perdas de moléculas neutras e radicais. Estabilidade de íons moleculares e de moléculas protonadas e desprotonadas.

Bibliografia:

1. A Beginner's Guide to Mass Spectral Interpretation, Terrence A. Lee.
2. Interpretation of Mass Spectra Fred W. McLafferty, Frantisek Turecek.