

***Chemical structure and reactivity: an orbital based approach***

**Dr James Keeler**

UNICAMP 15<sup>th</sup> July – 19<sup>th</sup> July 2019

University of Cambridge, Department of Chemistry

This short undergraduate course aims to develop an understanding of both molecular structure and chemical reactions from an orbital point of view. In particular, the intention is to show that an understanding of atomic and molecular orbitals, rather than being something confined to a physical chemistry course, is very helpful in understanding both the structures of a wide range of compounds and their reactions. Particular attention is paid to the relationship between orbitals and the familiar ‘curly arrow’ approach adopted by organic chemists. If time permits, we will also consider some more quantitative topics.

The level of chemistry in this course is not especially high, and the mathematical content is minimal. Rather, the intention is to show how what are probably already familiar concepts can be thought of in a new and unified way in order to obtain a better understanding on chemistry as a whole.

The course is closely based on *Chemical Structure and Reactivity: an integrated approach*, (James Keeler and Peter Wothers, Oxford University Press, Second Edition 2013). Click [here](#) for a link to the publishers website. A set of notes will be provided as a online resource.

We will cover Chapters 2–11, and some additional topics, time permitting.

This course will be divided in two parts: there will be lectures during the morning from 9:00 to 12:00, and in the afternoon there will be a tutorial session from 14:00 to 17:00. The aim is that, by working through the associated exercises, participants will be able to consolidate their knowledge.

Enquiries about the course content can be directed to James Keeler at [jhk10@cam.ac.uk](mailto:jhk10@cam.ac.uk)

## QO938 – Tópicos Especiais em Química Orgânica XIX

### Investigating Organic Mechanisms

Dr Peter Wothers

University of Cambridge

UNICAMP 22<sup>th</sup> July – 26<sup>th</sup> July 2019

The course looks at how it is possible to deduce how an organic reaction takes place. Often there are a number of different possibilities for how reactions happen and varying the conditions such as temperature, concentrations, solvents can all lead to different outcomes. The course covers some of the different experiments that can be carried out to learn more about the particular route a mechanism takes.

Topics included:

- A reminder of some key concepts from kinetics.
- Energy Profiles and reactions maps in one-dimension and more.
- Activation parameters – the determination and meaning of standard enthalpies, entropies, Gibbs energies, and volumes of activation.
- Kinetic isotope effects – primary, secondary, and solvent isotope effects.
- General and specific acid/base catalysis – how it is determined and what it tells us.
- The Brønsted Catalysis Law.
- The Hammett Equation – introduction and what can be learned from them. The meaning of non-linear relationships.
- Brønsted-type relationships for nucleophilic substitution reactions: the determination of and meaning of  $\beta_{\text{nuc}}$ ,  $\beta_{\text{lg}}$ , and  $\beta_{\text{eq}}$ . Their relation to effective charges, and their use in giving a view of the transition structure in a pathway.
- The role of the solvent – classification, meaning and use of different solvent parameters.
- The influence of the solvent on reaction mechanisms.

The following books are useful, BUT NOT ESSENTIAL. They might be useful to consult, but there is no need to purchase them.

Modern Physical Organic Chemistry  
Eric V. Anslyn and Dennis A. Dougherty  
University Science Books, 2006

The Physical Basis of Organic Chemistry  
H. Maskill  
Oxford University Press, 1996

Structure and Reactivity in Organic Chemistry  
H. Maskill  
Oxford Chemistry Primers (Number 81), 1999



### Disciplina Eletiva

Código	Nome
QA920	Tratamento, Análise e Apresentação de Dados Experimentais

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	AA200
Docente	José Alberto Fracassi da Silva

Ementa
Introdução à Análise de Dados. Utilização de planilhas de cálculos na análise de resultados experimentais. Apresentação de resultados experimentais utilizando programas gráficos. Métodos de condicionamento de sinais.

Programa
Introdução à análise de dados. Planilhas eletrônicas de cálculos. Programas gráficos na apresentação de resultados: Microsoft Excel e OriginLab. Apresentação de resultados experimentais 1 – Análise estatística. Apresentação de resultados experimentais. 2 – Análise espectral. Apresentação de resultados experimentais 3 – Análise cromatográfica. Ajuste de modelos matemáticos a dados experimentais. 4 - Condicionamento de sinais. Filtros digitais e transformadas.

Bibliografia
1. Skoog, D. A.; Holler, F. J.; Nieman, T. A.; Princípios de Análise Instrumental, 5ª edição, Bookman Companhia Editora, RS, Brasil, 2002. 2. D. C. Harris, Quantitative Chemical Analysis, 6a edição, W.H.Freeman, New York, 2003. 3. Miller, J. N.; Miller, J. C.; Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry, 5th edition, Pearson Education Limited, Harlow, England, 2005. 4. Neto, B. B.; Scarminio, I. S.; Bruns, R. E.; Como Fazer Experimentos: Pesquisa e Desenvolvimento na Ciência na Indústria, 3ª edição, Editora da Unicamp, Campinas, Brasil, 2007. 5. Artigos científicos relacionados aos temas abordados ao longo da disciplina.

Critérios de Avaliação
A avaliação constará de quatro atividades práticas programadas e executadas ao longo do semestre, cada uma com duração de duas horas. 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
QA929	Especiação 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%

Pré-Req	QA416
---------	-------

Docente	Anne Hélène Fostier
---------	---------------------

Ementa
Definição de especiação e fracionamento. Importância da especiação em estudos toxicológicos e ambientais. Fatores que influenciam a especiação química no ambiente e em organismos vivos. Análise de especiação: amostragem, técnicas de preparo de amostras visando a especiação química, fontes de erros, técnicas analíticas voltadas à especiação química.

Programa
Especiação química e fracionamento: definições e conceitos. Campos de aplicação da especiação química (toxicologia, metabolismo, contaminação ambiental, processos de tratamento de água e de remediação ambiental, extração mineral, ciclos biogeoquímicos dos elementos). Fatores que influenciam a especiação química no ambiente: pH, potencial de oxido-redução, matéria orgânica, alcalinidade, salinidade, atividade bacteriana. Fatores que influenciam a especiação química em organismos vivos: biodisponibilidade, função dos metais nos organismos Análise de especiação: amostragem, técnicas de preparo de amostras visando a especiação química Técnicas analíticas: métodos voltamétricos, técnicas hifenadas, uso de isótopos estáveis.

Bibliografia
Handbook of Elemental Speciation: Techniques and Methology, Rita Cornelis (Ed.), Wiley, 2003, 657p (ISBN: 0-471-49214-0). Handbook of Elemental Speciation, II: Species in the Environment, Food, Medicine and Occupational Health, Rita Cornelis (Ed.), Wiley, 2005, 784 p. (ISBN: 0-470-85598-3). Trends in Sample Preparation, Marco A. Z. Arruda (Ed.), Nova Science, 2006, 304p. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 2011. Themed collection: Speciation. 26(1), 1-236.

**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
QF932	Fundamentos de eletroquímica

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

Docente
Pablo Sebastián Fernández e Raphael Nagao de Sousa

Ementa
Definições e conceitos termodinâmicos fundamentais em eletroquímica. Modelos da Dupla Camada Elétrica. Adsorção de substâncias neutras e carregadas. Cinética de transferência de carga. Métodos experimentais para o estudo da interface sólido/líquido. Eletrocatalise.

Programa
Definições e conceitos termodinâmicos fundamentais; interfaces eletroquímicas: adsorção e dupla camada elétrica; adsorção de íons e moléculas neutras em eletrodos metálicos; modelos químicos da dupla camada: Helmholtz, Gouy-Chapman, Stern, Grahame, Bockris-Devanathan-Müller; isotermas de adsorção: Henry, Langmuir, e Frumkin; cinética de transferência de carga; equações empíricas de Butler-Volmer e Tafel; teoria de transferência eletrônica de Marcus; sobrepotenciais de ativação, ôhmicos e de transferência de massa; contribuição da dupla camada nas reações faradaicas; métodos experimentais para o estudo da interface sólido/líquido e a cinética de transferência de carga; eletrocatalise.

Bibliografia
BOCKRIS, J. O. M.; REDDY, A. K. N., Modern Electrochemistry 2A: Fundamentals of Electrode Processes. Springer: New York, 2000.
GILEADI, E., Physical Electrochemistry. Fundamentals, Techniques, and Applications. Wiley-VCH: Weinheim, 2011.
CONWAY, B. E., Theory and Principles of Electrode Processes. The Ronald Press Company: New York, 1965.
BARD, A. J.; FAULKNER, L. R., Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications. John Wiley & Sons: New York, 1980.
HAMANN, C. H.; HAMNETT, A.; VIELSTICH, W., Electrochemistry. Wiley-VCH: Weinheim, 2007.
TICIANELLI, E. A.; GONZALEZ, E. R., Eletroquímica: Princípios e Aplicações. Editora da Universidade de São Paulo: São Paulo, 2005.
SATO, N., Electrochemistry at Metal and Semiconductor Electrodes. Elsevier: Amsterdam, 1998.
SCHMICKER, W.; Santos, E. Interfacial Electrochemistry 2nd edition. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010.

**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
QF935	Fundamentos computacionais de simulações em Química

Vetor
F: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

Docente
Prof. Leandro Martínez

Ementa
<p>O curso pretende introduzir o aluno à programação numérica, uma ferramenta poderosa para a análise de dados e realização de simulações em qualquer ciência física.</p> <p>A linguagem de escolha será “Julia”, por ser uma linguagem de código livre, além de muito eficiente e intuitiva. Este será um curso de natureza fundamentalmente prática, abordando: Elementos básicos de programação numérica. Integração numérica de equações diferenciais. Condições de contorno. Análise de modos normais e componentes principais. Elementos básicos de otimização sem e com derivadas. Cinética de reações complexas. Integração de equações de movimento. Estabilidade. Simulações de Monte-Carlo. Propriedades estruturais. Cálculos de propriedades médias. Propriedades termodinâmicas.</p> <p>O curso é recomendado para qualquer aluno que tenha interesse em aprender programação, independentemente de sua área de atuação.</p>

Programa
<p><b>1 Elementos básicos de programação</b></p> <p>1.1 Estrutura básica do programa</p> <p><b>2 Primeiras simulações: cinética química</b></p> <p><b>3 Otimização com derivadas</b></p> <p>3.1 Minimizando com derivadas</p> <p>3.2 Funções de múltiplas variáveis</p> <p><b>4 Funções</b></p> <p><b>5 Minimização sem derivadas</b></p> <p>5.1 Gerador de números aleatórios</p> <p>5.2 Minimizando <math>x^2 + y^2</math></p> <p><b>5.3 O método Simplex</b></p> <p><b>6 Aplicando a otimização a um problema “real”</b></p> <p>6.1 Resultado experimental</p> <p>6.2 Comparação com a simulação</p> <p>6.3 Descobrimo as constantes de velocidade</p>



6.4 Refinamentos do programa

6.5 Usando funções prontas

**7. Análise de dados**

**8. Aplicações**

#### **Bibliografia**

- J. Bezanson, A. Edelman, S. Karpinski, V. B. Shah, Julia: A fresh approach to numerical computing. <https://arxiv.org/abs/1411.1607>

- Julia: The Julia Programming Language; <http://julialang.org>

- D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular Simulations. Academic Press, 2002.

#### **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)



<b>Disciplina Eletiva</b>	
<b>Código</b>	<b>Nome</b>
QF936	Vida e Obra de Grandes Físico-Químicos

<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>

<b>Docente</b>
Edvaldo Sabadini

<b>Ementa</b>
Serão apresentadas palestras sobre a vida e a obra de grandes cientistas que contribuíram para o desenvolvimento da Físico-Química. Os cientistas que serão apresentados serão: Langmuir, Bunsen, Lewis, Pauling, Ostwald, van der Waals, Boltzmann, Joule, Prigogine, Zewail, Arrhenius, Faraday, Gibbs.

<b>Programa</b>
Serão apresentadas palestras sobre a vida e a obra de grandes cientistas que contribuíram para o desenvolvimento da Físico-Química. Os cientistas que serão apresentados serão: Langmuir, Bunsen, Lewis, Pauling, Ostwald, van der Waals, Boltzmann, Joule, Prigogine, Zewail, Arrhenius, Faraday, Gibbs.

<b>Bibliografia</b>
Como será apresentada a vida e obra de vários cientistas, a literatura será fornecida ao longo da disciplina.

<b>Critérios de Avaliação</b>
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
QF942	Água e a Economia Circular

#### 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

**Docente** Fernando Galembeck

#### Ementa

Formação, estrutura e propriedades da água. Água na natureza. Usos humanos e papel econômico. Usos industriais. Captação, reciclagem, descarte. Água e energia. Progressos recentes, problemas em aberto.

#### Programa

Água no Universo; água na Terra; propriedades físico-químicas da água; propriedades químicas; água como solvente, dispersante e interfaces; água, vida e saúde; os usos da água, água na Química Verde; tratamentos de água e sistemas de suprimento; água e energia; economia e política da água; pesquisa sobre água: problemas atuais, centros importantes.

#### Bibliografia

Brian Fagan, "Elixir; A History of Water and Mankind", Bloomsbury NY, 2011. Felix Franks, "The Physics and Physical Chemistry of Water", Plenum, NY 1972. Fernando Galembeck e Thiago Burgo, "Chemical Electrostatics", Springer, Cham, 2017

#### 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: Os alunos receberão notas por participação na disciplina e por duas provas, sendo aprovados quando a nota final for igual ou superior a 5. Em caso contrário, deverão prestar exame.

Frequência: 75 % (\* O abono de faltas será considerado dentro do previsto no capítulo VI, seção X, artigo 72 do Regimento Geral de Graduação)



**PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS**

ACOMPANHAMENTO: QG968 – QI943

2º Semestre 2019

Disciplina	
Código	Nome
QG091	Petróleo e Petroquímica

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
QI245 + QO521

Docente
Heloise de Oliveira Pastore

Ementa
Esta disciplina visa introduzir o aluno às atividades envolvidas no processamento e refino do petróleo para produção de combustíveis e insumos para a indústria petroquímica. Polimerização e polímeros baseados no petróleo, assim como outras fontes de energia e de insumos (gás natural, gás de síntese e metanol), são também abordadas, sempre sob o ponto de vista químico.

Programa
<ol style="list-style-type: none"><li>Processamento do óleo cru e produção de hidrocarbonetos<ul style="list-style-type: none"><li>-Introdução ao Refinamento de Óleo</li><li>- Processos de separação física (destilação à pressão atmosférica e reduzida, processos de absorção e adsorção, extração com solventes)</li><li>- Processos de conversão</li><li>-Processos de conversão térmica</li><li>-Processos de conversão catalítica</li><li>-Craqueamento catalítico em leito fluido (FCC)</li><li>-Hidroisomerização de parafinas</li><li>-Isomerização esquelética de olefinas</li><li>-Alquilação de olefinas/parafinas</li><li>-Processos de upgrading de gasolina</li><li>-Processos de upgrading do destilado médio</li><li>-Desengraxamento catalítico</li><li>-Hidrocraqueamento</li><li>-Hidroprocessamento do resíduo</li><li>-Produção de olefinas</li></ul></li><li>Insumos baseados no metano<ul style="list-style-type: none"><li>-Reações diretas do metano (dissulfeto de carbono, clorometano, ácido cianídrico)</li><li>-Reações do gás de síntese (amônia, metanol, aldeídos, etilenoglicol, álcoois)</li></ul></li><li>Insumos baseados no Etano e homólogos de maior massa molecular (propano, n- e i-butano, nafta, etc.)</li><li>Insumos baseados no Etileno (óxido de etileno, acetaldeído, carbonilação oxidativa do etileno, cloreto de vinila, percloro e tricloroetileno, produção de alfa olefinas, álcoois lineares, 1-buteno, produtos de alquilação)</li><li>Insumos baseados no Propileno (acroleína, ácido acrílico, isopropanol, óxido de propileno, processos de acilação, cloração, adição de ácidos orgânicos, hidroformilação, desproporcionamento, alquilação).</li><li>Insumos baseados no C<sub>4</sub>= e diolefinas<ul style="list-style-type: none"><li>-n-butenos (oxidação e oligomerização)</li></ul></li></ol>

- i-butileno (oxidação, epoxidação, adição de álcoois, hidratação, carbonilação, dimerização)
- butadieno (adiponitrila, hexametilenodiamina, ácido adípico, butanodiol, cloropreno, oligômeros cíclicos)
- 7. Insumos baseados no benzeno, tolueno e xileno (alquilação, desalquilação, cloração, nitração, oxidação, hidrogenação, disproporcionamento, carbonilação, produção de ácido tereftálico, anidrido ftálico, ácido isoftálico, ...).
- 8. Polimerização (reações e técnicas)
- 9. Polímeros baseados no petróleo (termoplásticos e termofixos, borracha e fibras sintéticas)
- 10. Outras fontes de energia e de insumos
  - Gás natural
  - Introdução aos processos de conversão
  - Gás de síntese a gasolina
  - Metanol a gasolina
  - Metanol a olefinas leves
  - GLP a aromáticos.
  - Energia solar
  - Células a combustível

#### **Bibliografia**

1. S. Matar, L. F. Hatch, Chemistry of Petrochemical Processes, 2nd Edição, Butterworth-Heinemann, 2001, Boston.
2. I. E. Maxwell, W. H. J. Stork, Hydrocarbon processing with zeolites, IN *Introduction to zeolite science and practice*, H. van Bekkum, E. M. Flanigen, P. A. Jacobs e J. C. Jansen, eds., 2<sup>nd</sup> edição, Elsevier, Amsterdam, p. 707.
3. H. W. Kouwenhoven, B. de Kroes, Preparation of zeolite catalysts, IN *Introduction to zeolite science and practice*, H. van Bekkum, E. M. Flanigen, P. A. Jacobs e J. C. Jansen, eds., 2<sup>nd</sup> edição, Elsevier, Amsterdam, p. 673.
4. Bibliografia atualizada 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)



ACOMPANHAMENTO: QO921

Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QG965	Introdução à Propriedade Intelectual - Patentes de Invenção nas Indústrias Químicas e Farmacêuticas

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
Docentes	Julio Cezar Pastre/ Ana Olivia Tiroli Cepeda

Ementa
Princípios Gerais da Propriedade Intelectual. Noções sobre os diferentes tipos de Propriedade Intelectual. A proteção por patentes. Estrutura de um documento de patentes. Depósito e processo de exame dos pedidos de patentes. Legislação de Propriedade Industrial Brasileira. Importância das patentes para a Indústria e para o meio acadêmico. Informação tecnológica. Contratos de licenciamento. Marcas de medicamentos. Estudos de casos.

Programa
<b>Módulo I (2 aulas)</b> 1 – Princípios Gerais da Propriedade Intelectual Objetivo: este módulo tem como objetivo apresentar os princípios gerais que regem a Propriedade Intelectual, apresentando os principais tipos de Propriedade Intelectual, definições e estratégias de proteção de bens intangíveis. Histórico e legislação referente à Propriedade Industrial no Brasil. <ul style="list-style-type: none"><li>- Propriedade Intelectual: tipos, definições, dimensões e esclarecimentos das diferentes estratégias de proteção de bens intangíveis.</li><li>- Noções de direitos autorais, marcas, indicações geográficas, desenho industrial e patentes.</li><li>- Transferência de tecnologia.</li><li>- Outros instrumentos de proteção.</li><li>- Histórico da Propriedade Industrial no Brasil.</li><li>- Tratados Internacionais.</li><li>- Introdução à Lei da Propriedade Industrial (LPI – Lei N.º. 9.279/96 - Lei de Patentes Brasileira): quanto dura a vigência de uma patente brasileira.</li></ul>

## **Módulo II (4 aulas)**

### **2- Patentes**

Objetivo: este módulo tem como objetivo aprofundar o entendimento sobre a proteção por patentes de invenção, especificamente nas áreas química e farmacêutica, detalhando a legislação e a estrutura básica de um documento de patente.

- O que é a proteção por Patentes e exemplos de proteções que podem ser empregadas nas áreas química e farmacêutica.
- A Patente de Invenção e os requisitos de patenteabilidade (novidade, atividade inventiva e aplicação industrial), além de requisitos como suficiência descritiva e sua importância para a proteção que será conferida à invenção.
- O que é patenteável e o que é vetado de proteção (Lei da Propriedade Industrial – Lei N°. 9.279/96), comparação com outras legislações.
- O que é período de graça e qual a importância da não divulgação de uma invenção. Definição e importância da prioridade unionista para a invenção.
- Exceção à regra: apresentação das patentes pipeline e mailbox e seu prazo de vigência.
- Qual a estrutura básica de um documento de patente? As reivindicações e sua importância na determinação do escopo de proteção de uma invenção.
- Os diferentes tipos de reivindicações: dependentes e independentes e as diferentes categorias das mesmas.
- Apresentação do INPI (Instituto Nacional da Propriedade Industrial), bem como a documentação necessária para o depósito.

## **Módulo III (4 aulas)**

### **3- Depósito e processo de exame do pedido de Patente**

Objetivos: este módulo tem como objetivo detalhar todo o processo de exame de pedidos de patentes brasileiros, bem como apresentar mecanismos de interferência de terceiros no processo de exame do INPI.

- Diretrizes para exame de pedidos de patentes (Resolução n° 262 de 13 de janeiro de 2011);
- Mecanismos de envolvimento de terceiros no exame de pedidos de patente pelo INPI: os subsídios técnicos ao exame, as contrarrazões e pedidos administrativos de nulidade (custos e prazos envolvidos);
- O acompanhamento de exames de pedidos de patente no INPI: como acompanhar um pedido, como identificar a necessidade de pagamento de taxas e/ou anuidades, bem como a necessidade de responder a exigências.
- A polêmica participação da ANVISA no processo de exame de pedidos de patentes de produtos e processos farmacêuticos.
- Formas de depósito de pedidos de patentes: CUP e PCT.

## **Modulo IV (2 aulas)**

### **4- Importância das patentes para a Indústria e para o meio acadêmico**

Objetivo: este módulo tem como objetivo entender a importância de um portfólio de patentes para as empresas, quanto no sentido de exceções a regras existentes para este tipo de proteção. Além de detalhar a importância das informações contidas nos documentos de patente como fonte de informação para pesquisa e desenvolvimento.

- A importância de um portfólio de patentes: defesas de empresas em ações de infração e nulidades de patentes;
- O objetivo de uma busca de liberdade de exploração: a importância de análises de liberdade de exploração para avaliação da possibilidade de exploração de tecnologias em diferentes países;
- O que não se considera infração de patentes: flexibilidades permitidas pelo TRIPS – a Exceção bolar e sua adoção pelas legislações Brasileira, Americana e Europeia.
- Fontes de informação disponíveis e levantamento do estado da técnica: as diferentes estratégias de uso das informações contidas em documentos de patentes.

### **Modulo V (2 aulas)**

#### 5- Contratos de tecnologia

Objetivo: este módulo tem como objetivo entender o que é e o que pode ser objeto de um contrato de tecnologia, bem como conhecer os prazos e as remunerações envolvidas no uso dos direitos.

- Definições de contratos de transferência de tecnologia e de cooperação tecnológica.
- O que pode ser objeto de licenciamento.
- Abrangência dos direitos e prazos de vigência.
- Como se calcula a remuneração pelo uso dos direitos de terceiros.
- Licença compulsória: o que está previsto na legislação.
- Contratos de cessão de direitos de Propriedade Industrial.
- Registro de contratos no INPI e remessa de royalties para o exterior.

### **Modulo VI (1 aula)**

#### 6- Marcas de medicamentos

Objetivo: apresentar os requisitos mínimos necessários para ter uma marca de medicamento aprovada no Brasil.

- Legislação Brasileira a respeito de marcas de medicamentos, o que é permitido e o que é vetado.
- Registro de marca no INPI: classes, dimensões e tempo de vigência.
- Aprovação de marca de medicamento pela ANVISA.

### **Modulo VI (Incorporado aos demais módulos/aulas)**

- Estudos de casos e/ou exercícios: os estudos de casos serão parte da abordagem de todos os módulos, sendo utilizados como forma de demonstração e exemplificação dos diferentes conceitos abordados e possuem o objetivo de melhorar o entendimento sobre os temas abordados.
- Oportunidade de carreira na área de propriedade industrial: durante todo o curso será apresentado conteúdo prático como forma de mostrar o campo de trabalho do profissional técnico na área de Propriedade Industrial, especificamente com marcas e patentes, bem como a sua importância para o cenário da inovação.



### **Bibliografia**

- LEI N° 9.279, DE 14 DE MAIO DE 1996.
- BARBOSA, Denis Borges. *Uma introdução à propriedade intelectual*. Lumen Júris. 2ª edição, Rio de Janeiro, 2003.
- MACEDO, Maria Fernanda Gonçalves. *Patentes, Pesquisa & Desenvolvimento : Um manual de propriedade intelectual*. – Primeira Edição. Rio de Janeiro. FIOCRUZ – 2000.
- TRIPS: ACORDO SOBRE ASPECTOS DOS DIREITOS DE PROPRIEDADE INTELECTUAL RELACIONADOS AO COMÉRCIO (contido no Decreto N° 1.355, de 30 de Dezembro de 1994).
- OLIVEIRA, Ana Cláudia Dias. ESTUDOS DE PROPRIEDADE INTELECTUAL. Marcelo Nogueira, 1º edição, Rio de Janeiro, 2018.

### **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)



**PROGRAMAS E BIBLIOGRAFIAS**

**Disciplina Eletiva**

<b>Código</b>	<b>Nome</b>
QG981	Tópicos Especiais em Ensino de Química I

<b>Vetor</b>
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%

<b>Pré-Req</b>	AA200
----------------	-------

<b>Docente</b>	Gildo Giroto Júnior
----------------	---------------------

<b>Ementa</b>
Abordagem de temas contemporâneos direta ou indiretamente relacionados ao Ensino de Química, com articulação de conhecimento científico, produções bibliográficas e material instrucional. Especificidades serão descritas por ocasião do oferecimento da disciplina.

<b>Programa</b>
A ser definido por ocasião do oferecimento da disciplina.

<b>Bibliografia</b>
Será fornecida por ocasião do oferecimento da disciplina.

<b>Critérios de Avaliação</b>
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
QI853	Introdução à Cristalografia

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
QI145

Docente
Juan Carlos Tenorio Clavijo

Ementa
Cristais e estruturas cristalinas. Retículos cristalinos e simetria espacial. Sistemas cristalinos. Difração em cristais: raios X, nêutrons e elétrons. Introdução à determinação de estrutura cristalina. Exemplos de minerais, compostos iônicos e moleculares.

Programa
<ul style="list-style-type: none"><li>- Retículos cristalinos e o experimento de difração; espaço recíproco e fatores de estrutura.</li><li>- Simetria cristalina; simetria envolvendo a translação; sistemas cristalinos e grupos espaciais.</li><li>- Métodos experimentais: processos e métodos de cristalização; coleta de dados para monocristais e amostras policristalinas. Difração de raios X, nêutrons e elétrons.</li><li>- Solução e refinamento de estruturas; métodos de Patterson e diretos; método dos mínimos quadrados. Desordem. Dispersão anômala.</li><li>- Bancos de dados cristalográficos.</li></ul>

Bibliografia
<b>Básica</b> <ol style="list-style-type: none"><li>1) Hammond, C. The basics of crystallography and diffraction. 3rd ed. Oxford, N.Y. : Oxford University Press, 2009.</li><li>2) Massa, W. Crystal structure determination. 2nd ed. Berlin : Springer, 2004.</li><li>3) Clegg, W. Crystal structure determination. Oxford : Oxford University Press, 1998.</li><li>4) Giacovazzo, C. Fundamentals of crystallography. 2<sup>nd</sup> ed. Oxford: Oxford Univ. Press, 2002</li><li>5) Woofson. An Introduction to X-ray Crystallography. 2<sup>nd</sup> ed. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1997.</li></ol> <b>Complementar</b> <p>International Tables for Crystallography. Dordrecht ; London :Published for the International Union of Crystallography by Kluwer Academic Publishers</p>

**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)



<b>Disciplina Eletiva</b>	
<b>Código</b>	<b>Nome</b>
QI952	Desenvolvimento Profissional para Químicos

<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>

<b>Docente</b>
Juliano Alves Bonacin

<b>Ementa</b>
O objetivo dessa disciplina é fomentar uma discussão sobre qual carreira seguir após a conclusão do curso de química. Dentro desse contexto serão introduzidos alguns elementos indispensáveis para carreiras em empresas ou como empreendedores. Como resultado, os alunos terão que elaborar um planejamento individual de sua própria carreira.

<b>Programa</b>
<ul style="list-style-type: none"><li>-Carreira na academia, na empresa e como empreendedor;</li><li>-Introdução a gestão de projetos</li><li>-Como preparar uma apresentação vencedora</li><li>-Como se preparar para uma entrevista de emprego</li><li>-Como resolver problemas</li><li>-Gestão de tempo</li><li>-Gestão do conhecimento</li><li>-Industria 4.0</li><li>-Economia para químicos</li><li>-Como fazer um estudo de mercado</li><li>-Marketing pessoal e venda de ideias</li><li>-Discussão e sugestões de temas levantados pelos alunos</li></ul>

<b>Bibliografia</b>
A ser fornecida pelo professor

<b>Crítérios de Avaliação</b>
<ol style="list-style-type: none"><li>1. Elaboração de um plano individual de carreira.</li><li>2. Frequência: 75 %</li></ol>



Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QI958	Fotossíntese artificial

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%

Pré-Req
QG108

Docente
André Luiz Barboza Formiga

Ementa
Fotossíntese natural; fotossíntese artificial; catálise e eletrocatalise em estudos de fotossíntese artificial; células fotoeletroquímicas

Programa
<ul style="list-style-type: none"><li>• Fotossíntese natural – visão bioinorgânica</li><li>• Processos de transferência de energia</li><li>• Transferência eletrônica fotoinduzida</li><li>• Transferência eletrônica acoplada à transferência de prótons</li><li>• Catalisadores homogêneos e heterogêneos para evolução de hidrogênio e/ou oxigênio.</li><li>• Fixação e Redução de CO<sub>2</sub></li><li>• Células fotoeletroquímicas</li></ul>

Bibliografia
Artigos selecionados pelo professor. Collings, A. F.; Critchley, C.; Artificial Photosynthesis: From Basic Biology to Industrial Application, Wiley, 2005. Balzani, V.; Credi, A.; Venturi, M.; Molecular Devices and Machines – A Journey into the Nano World, Wiley, 2003. Voet, D.; Voet, J.; Pratt, C.; Fundamentos de Bioquímica, Artmed, 2000.

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
QO922	Introdução à Físico-Química Orgânica

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	Rodrigo Antonio Cormanich
---------	---------------------------

Ementa
Estrutura e modelos de ligação química, Termodinâmica e estabilidade de compostos orgânicos, Análise conformacional e estereoquímica, Superfícies de energia potencial e análise cinética de reações orgânicas, Ferramentas de estudos de mecanismos de reação e suas aplicações em reações de adição e eliminação, reações de substituição e rearranjos; Introdução à cálculos teóricos para entendimento de estrutura e reatividade de compostos orgânicos.

Programa
<ol style="list-style-type: none"><li>1. Estrutura e modelos de ligação química</li><li>2. Termodinâmica e estabilidade de compostos orgânicos<ol style="list-style-type: none"><li>a) Entalpia, entropia e energia livre de Gibbs</li><li>b) Termodinâmica de compostos orgânicos estáveis e intermediários reativos</li></ol></li><li>3. Análise conformacional<ol style="list-style-type: none"><li>a) Efeitos estéricos e eletrostáticos e estereoeletrônicos</li><li>b) Métodos espectroscópicos em análise conformacional</li></ol></li><li>4. Superfícies de energia potencial e análise cinética de reações orgânicas<ol style="list-style-type: none"><li>a) Teoria do estado de transição</li><li>b) Postulados e princípios relacionados com cinética de reações</li><li>c) Análise de cinética para mecanismos simples</li></ol></li><li>5. Ferramentas relacionadas ao estudos de mecanismos de reação<ol style="list-style-type: none"><li>a) Efeitos isotópicos cinéticos</li><li>b) Relações lineares de energia livre</li><li>c) Experimentos para estudo de mecanismos de reações</li></ol></li><li>6. Aplicações em reações de adição, substituição e rearranjos</li><li>7. Introdução à cálculos teóricos para entendimento de estrutura e reatividade de compostos orgânicos.<ol style="list-style-type: none"><li>a) Métodos de química computacional</li><li>b) Cálculos de propriedades estruturais e espectroscópicas</li><li>c) Natural Bond Orbitals (NBO)</li><li>d) Quantum theory of atoms in molecules (QTAIM)</li></ol></li></ol>

**Bibliografia**

1. Anslyn, E. V.; Dougherty, D. A. Modern physical organic chemistry. University Science: California, 2006.
2. Carroll, F. A. Perspectives on Structure and Mechanism in Organic Chemistry. 2nd Ed., Wiley, New Jersey, 2011.

**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)





<b>Disciplina Eletiva</b>	
<b>Código</b>	<b>Nome</b>
QO930	Introdução à Química Medicinal e à Síntese de Fármacos

<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>	QO321
----------------	-------

<b>Docente</b>	FERNANDO ANTONIO SANTOS COELHO
----------------	--------------------------------

<b>Ementa</b>
Princípios gerais de química medicinal. Principais definições da área. Descoberta e Desenvolvimento de Fármacos. Princípios básicos de farmacodinâmica e farmacocinética. Síntese de fármacos

<b>Programa</b>
<ol style="list-style-type: none"><li>1. Objetivos e Critérios. Introdução à Química Medicinal Aspectos Gerais, Características da área; Principais definições</li><li>2. Descoberta, Desenho e Desenvolvimento de Medicamentos</li><li>3. Absorção, Distribuição, Metabolização e Excreção de Fármacos – noções básicas 3. Sítios de Ação dos Medicamentos Características Gerais das Células Estrutura das Proteínas.</li><li>4. Noções básicas sobre a Teoria dos Receptores.</li><li>5. Ação dos Medicamentos a nível das Enzimas e de Ácidos Nucleicos.</li><li>6. Noções Básicas de Estudos Quantitativos da Relação Estrutura-Atividade (QSAR). Parâmetros Físico-Químicos utilizados na Concepção de Medicamentos. O desenho de Novos Medicamentos. Estudo de Casos.</li><li>6. Pro-Drogas: Definição. Como funcionam e quais as principais vantagens</li><li>7. Aspectos gerais da síntese de fármacos. Estudos de casos</li></ol>

<b>Bibliografia</b>
Garry L. Patrick, An Introduction to Medicinal Chemistry, Oxford University Press, 6a Edição, 2017. Marc W. Harrold; Robin M. Zavod, Basic Concepts in Medicinal Chemistry, American Society of Health System – Pharmacists, 1a Edição, 2013. Silverman R.B.; Mark W. Holladay, The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action, Academic Press Inc., 3a Edição, 2014

**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)