



Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QA910	Tópicos Especiais em Química Analítica I Quimiometria em Química Analítica

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
QA-416 ou QA-582

Docente
Ronei Jesus Poppi

Ementa
Aplicação da análise multivariada para tratamento de dados químicos. Análise Exploratória de dados; classificação; calibração multivariada e resolução multivariada de curvas.

Programa
Quimiometria: definições e aplicações. Reconhecimento de padrões e classificação utilizando análise de componentes principais, KNN e SIMCA. Calibração multivariada baseada no método dos mínimos quadrados parciais. Resolução multivariada de curvas utilizando o método MCR. Análise de dados de ordem superior utilizando o PARAFAC. Utilização de programas computacionais relacionados aos tópicos do curso para tratamento de dados químicos reais. Palestras com usuários da indústria mostrando as possibilidades de aplicação da Quimiometria.

Bibliografia
1. G. E. P. Box, J. S. Hunter, W. G. Hunter, Statistics for Experimenters, John Wiley and Sons, New Jersey, 2005. 2. R. G. Brereton, Chemometrics – Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant, Wiley, Chichester, 2003. 3. M. Otto, Chemometrics - Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry, Wiley-VCH, Weinheim, 1999. 4. H. Martens e T. Naes, "Multivariate Calibration", Wiley, New York, 1991. 5. M. M. C Ferreira, Quimiometria: Conceitos, métodos e Aplicações Ed. UNICAMP, 2015

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
QF938	Tópicos Especiais em Físico-Química IX Dinâmica Química Não-linear: Oscilações, Padrões e Caos

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
Raphael Nagao de Sousa

Ementa
Análise de estabilidade e linearização; bifurcações; teorema de Poincaré-Bendixson e ciclo limite; construção do espaço de fase; método do atraso; extração de informações topológicas; caos: atrator estranho de Lorenz e mapa logístico; rotas para o caos; expoente de Lyapunov; fractais: conjuntos de Mandelbrot e Julia; universalidade; modelo de fase reduzido de Kuramoto; sincronização; multiestabilidade, excitabilidade e oscilações em sistemas químicos; noções da termodinâmica de processos irreversíveis de Prigogine; estruturas dissipativas; auto-organização e complexidade; a reação de Belousov-Zhabotinsky e padrões de Turing.

Programa
<ol style="list-style-type: none">1. Fluxos em dimensão 1<ol style="list-style-type: none">1.1 Introdução1.2 Pontos fixos e estabilidade1.3 Análise de estabilidade linear1.4 Existência e unicidade de soluções1.5 Bifurcações2. Fluxos em dimensão 2<ol style="list-style-type: none">2.1 Sistemas lineares2.2 Retrato de fase2.3 Pontos fixos e linearização2.4 Teorema de Poincaré-Bendixson2.5 Bifurcação de Hopf2.6 A reação de Belousov-Zhabotinsky3. Caos<ol style="list-style-type: none">3.1 O atrator de Lorenz e mapa logístico3.2 Universalidade3.3 Fractais3.4 Caos químico4. Noções da termodinâmica de processos irreversíveis<ol style="list-style-type: none">4.1 Produção de entropia4.2 Relações recíprocas de Onsager4.3 Estruturas dissipativas4.4 Padrões de Turing na reação CDIMA4.5 Quebra de simetria quiral e vida4.6 Aplicações: nanotecnologia e computação química

Bibliografia

1. STROGATZ, S. H., Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry, and Engineering. Addison-Wesley: Cambridge, 1994.
2. HILBORN, R. C., Chaos and Nonlinear Dynamics. Oxford Press: New York, 2000.
3. SCOTT, S. K., Oscillations, Waves, and Chaos in Chemical Kinetics. Oxford University Press: Oxford, 1994.
4. EPSTEIN, I. R.; POJMAN, J. A., Introduction to Nonlinear Chemical Dynamics. Oscillations, Waves, Patterns and Chaos. Oxford University Press: New York, 1998.
5. KONDEPUDI, D.; PRIGOGINE, I., Modern Thermodynamics: From Heat Engines to Dissipative Structures. John Wiley & Sons: Chichester, 1998.

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
QF940	Tópicos Especiais em Físico-Química XI Bioquímica do óxido nítrico e de doadores de óxido nítrico

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 ou QG 100 ou QG 101 ou QG 107

Docente
Marcelo Ganzarolli de Oliveira

Ementa
<p>O óxido nítrico (NO) é uma molécula sinalizadora diatômica de importância fundamental nos sistemas cardiovascular, imune e nervoso. A pesquisa sobre a bioquímica do NO tem levado a novas estratégias terapêuticas baseadas no desenvolvimento de formulações capazes de liberar NO de forma sistêmica ou localizada. Esta disciplina abordará vários aspectos da química e bioquímica do NO e de moléculas doadoras de NO e suas implicações terapêuticas. Os tópicos envolvidos são: Propriedades químicas do NO e de outros óxidos de nitrogênio;</p> <p>Química biológica do óxido nítrico; Química biológica do peroxinitrito; Regulação da produção endógena de óxido nítrico; Óxido nítrico e estresse oxidativo; Mecanismos de transdução de sinal mediados pelo óxido nítrico; Óxido nítrico e o sistema nervoso; Óxido nítrico na regulação do fluxo sanguíneo; Óxido nítrico e o sistema imune; Óxido nítrico e agregação plaquetária; Doadores de óxido nítrico em uso farmacêutico corrente; Biomateriais e formulações de doadores de óxido nítrico experimentais.</p>

Programa
<ol style="list-style-type: none">1-Retrospectiva histórica2- The Physiological and Pathological Chemistry of Nitric Oxide.3-Why Does Nitric Oxide Have an Unpaired Electron?4-Oxygen reactions5-Metal reactions6-Why Is Nitric Oxide Used as an Intercellular Messenger?7-How Is Information Communicated by Nitric Oxide?8- The Physiological and Pathological Chemistry of Nitric Oxide: pp. 18-289-Why is the half-life of nitric oxide so short in vivo10-Chemistry of nitric oxide and related nitrogen oxides11-Nitric Oxide, Nitrosonium Ion, and Nitroxyl Anion12-The Physiological and Pathological Chemistry of Nitric Oxide13-Nitrosating reactions14-Nitrogen Dioxide, Nitronium Cation, and Nitrite15-The Physiological and Pathological Chemistry of Nitric Oxide: pp. 18-2816-Dimerization Reactions between Nitric Oxide and Nitrogen Dioxide Thiols, Nitric Oxide, Nitrosothiols, and Endothelium-Derived Relaxing Factor17-Nitrosothiols, and Endothelium-Derived Relaxing Factor18- The chemistry of nitric oxide reacting with superoxide19-How Does Superoxide Dismutase Reduce Tissue Injury?20-Diffusion Distances of Hydroxyl Radical and Peroxynitrite21-Historical Studies on Peroxynitrite

- 22-Radiation Damage to Nitrate and the Viking Mars Mission
- 23-Complex Reactivity of Peroxynitrite
- 24-The chemical properties of NO and related nitrogen oxides: pp. 30-37
- 25-The reactions of NO with metals
- 26-The reaction of NO and NO-derived species with thiols
- 27-Reduced NO species
- 28-The chemistry of S-nitrosothiols
- 29-The antioxidant properties of NO: pp. 265-273
- 30-In Vitro Inhibition of Linoleic Acid Peroxidation by Primary S-Nitrosothiols
- 31-Cage recombination and the stability of S-nitrosothiols
- 32-Photochemical release of NO - Is sunlight good for our heart?
- 33-Other experimental NO donors
- 34-Methods of Detection and Quantification of NO

Bibliografia

- 1) Nitric Oxide Biology and Pathobiology. Edited by Louis Ignarro, Academic Press – 2000
ISBN: 978-0-12-370420-7
- 2) Nitric Oxide – Principles and Actions. Edited by Jack Lancaster, Jr., Academic Press, 1996
ISBN: 0-12-435555-2
- 3) Nitrosation Reactions and the Chemistry of Nitric Oxide. DHL Williams, Elsevier, 2004
ISBN: 0-444-51721-9

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
QG-092	Geoquímica 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	QO-321
----------------	--------

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

Ementa
A Geoquímica Orgânica complementa um conjunto de áreas como geologia, paleontologia, biologia, engenharia do petróleo, visando a caracterização dos óleos e sedimentos, obtendo dados sobre a origem, rocha de geração, migração e condições dos reservatórios do petróleo, através de estudos dos marcadores biológicos.

Programa
-Visão do petróleo no Brasil e no Mundo -Teorias da origens e composição do petróleo - Sistemas Petrolíferos; Acumulação, da matéria Orgânica e qualidade da MO. -Condições Geológicas para acumulação do Petróleo. -Importantes componentes dos Petróleos. - Denominados marcadores Biológicos. -Análises geoquímicas. Preparação dos solventes Hidrocarbonetos I. -Análises geoquímicas. Preparação dos solventes Hidrocarbonetos II. - Bioderagação. -Maturação. -Parâmetro Geoquimico I. -Parâmetro Geoquimico II. - Fracionamento do Petróleos -Tratamento de Ácidos. -Análises de componentes ácidos.

Bibliografia
1. Tissot, B.P. and Welte, D.H.; "Petroleum Formation and Occurrence" Spring-Verlag, New York, 1984. 2. Annes Mccann Baker et alli, Association of Desk Derrick Clubs, "Fundamentals of Petroleum", third Edition, Mildred Gerding 1986, 3. Kenneth, E. P. ; Moldowan, J. M.; "The Biomarker Guide - Interpreting molecular Fossil in Petroleum and Ancient Sediments ", Prentice Hall, Englewood Clifts, New Jersey 07632 (2005).

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)



Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QI941	Tópicos Especiais em Química Inorgânica II Técnicas de caracterização aplicadas a sólidos

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	QI 245
----------------	--------

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

Ementa
Interação da radiação com a matéria. Técnicas de espalhamento e técnicas espectroscópicas. Microscopias.

Programa
<ol style="list-style-type: none">1. Revisão das propriedades eletrônicas e estruturais de sólidos.2. Interação da radiação e elétrons com a matéria.3. Fontes de radiação convencionais e luz síncrotron.4. Técnicas de espalhamento: difração de raios X e utilização na indústria5. Técnicas espectroscópicas: informações utilizando diferentes comprimentos de onda (infravermelho, ultravioleta-visível e raios X)6. Caracterização de sólidos com resolução espacial: microscopias eletrônicas.7. Exemplos práticos de aplicações na caracterização de sólidos e sua importância na indústria.

Bibliografia
A. R. West. Solid State Chemistry and its applications. 2nd ed. Chichester :John Wiley, 2014. 556p. A ser fornecida pelo professor.

Critérios de Avaliação
Frequência: 75 % Duas Avaliações. Médias das avaliações > 5.0 (aprovado). < que 5.0 (Exame). Média da nota do Exame com a média das provas. 5 (aprovado). < 5 (reprovado)



Disciplina Eletiva	
Código	Nome
QI950	Tópicos Especiais em Química Inorgânica XI CIÊNCIA, TECNOLOGIA E INOVAÇÃO: reflexões e cases

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	QI 345
----------------	--------

Docente	Oswaldo Luiz Alves
----------------	--------------------

Ementa
Considerações sobre o impacto da Ciência para a civilização. Ciência no Brasil: o papel da Academia Brasileira de Ciências. Química: singularidades. A questão da Empregabilidade: as novas habilidades. Observações sobre a cultura de patentes. Interação da academia com o setor produtivo: tecnologia e inovação. Exemplos de caso de inovações brasileiras. Perspectivas de futuro: Ciência, Tecnologia e Inovação para o Brasil.

Programa
A presente disciplina tem por objetivo tratar das conexões entre ciência, tecnologia e inovação, valendo-se de aspectos históricos, tendências e perspectivas destes diferentes aspectos da atividade, dentro da perspectiva da Química. Procurar-se-á, também, analisar e discutir como estes aspectos impactam a questão da empregabilidade na corrente das novas habilidades, sobretudo, aquelas associadas às novas ferramentas, tais como a inteligência artificial. Será tratado, ainda, a relação entre setor acadêmico e setor industrial nas suas complementaridades, diferenças e alguns aspectos da propriedade intelectual. O curso será finalizado com considerações sobre "cases" de inovação brasileiros e reflexões sobre o projeto de ciência e tecnologia e inovação, recentemente veiculado pela Academia Brasileira de Ciências, do qual fizemos parte da elaboração.

Bibliografia
A ser fornecida pelo professor.

Critérios de Avaliação
Frequência: 75 % Duas Avaliações. Médias das avaliações > 5.0 (aprovado). < que 5.0 (Exame). Média da nota do Exame com a média das provas. 5 (aprovado). < 5 (reprovado)