

DISCIPLINAS OFERECIDAS NO 1º SEMESTRE/99

QP171 Turma "A"	Dissertação de Mestrado	Créditos: 72
QP181 Turma "A"	Tese de Doutorado	Créditos: 144
QP021 Turma "A"	Química Orgânica Avançada Prof. Dr. José Augusto Rosário Rodrigues Ementa: Ligação química. Ligações localizadas e deslocalizadas. Estereoquímica. Relações entre estrutura e reatividade. Tipos fundamentais de reações orgânicas.	Créditos: 12 VAGAS: mínimo: 03 máximo: 20
QP141 Turma "A"	Química Inorgânica Avançada Profa. Dra. Maria Domingues Vargas Ementa: Teoria de ligação de valência e teoria de orbitais moleculares aplicada a sistemas inorgânicos. Os sistemas covalentes e iônicos através da tabela periódica. A química dos metais de transição, do boro, do silício, etc.	Créditos: 12 VAGAS: mínimo: 03 máximo: 14
QP222 Turma "A"	Métodos Físicos em Química Orgânica Prof. Dr. Roberto Rittner Neto Ementa: Espectroscopia no infravermelho. Espectrometria de ressonância magnética nuclear. Espectroscopia no ultravioleta. Espectrometria de massas. Utilização conjunta das diversas técnicas.	Créditos: 12 VAGAS: mínimo: 03 máximo: 20
QP232 Turma "A"	Química Quântica II Pré-Requisito: QP031/AA200 Prof. Dr. Rogério Custodio Ementa: Método SCF de Hartree-Fock para camada aberta. Cálculos moleculares. Métodos NDO. Cálculos "ab initio" gaussianos. Teorias de correlação: Interação de configuração, "coupled cluster" e métodos de perturbação.	Créditos: 12 VAGAS: mínimo: 03 máximo: 20

<p>QP313</p> <p>Turma "A"</p>	<p>Métodos Espectroquímicos de Análise</p> <p>Profs. Drs. João Carlos de Andrade, Marco Aurélio Zezzi Arruda e Maria Izabel Maretti Silveira Bueno</p> <p>Ementa: Métodos baseados na absorção, emissão e espalhamento da radiação eletromagnética. Sensores óticos.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p>
<p>QP314</p> <p>Turma "A"</p>	<p>Métodos Analíticos Aplicados à Determinação de Traços</p> <p>Profs. Drs. Nivaldo Baccan; Solange Cadore e Carol H. Collins</p> <p>Ementa: Aspectos gerais da determinação de baixas concentrações de espécies orgânicas e inorgânicas: pré-concentração, separação e especiação. Considerações básicas sobre o papel da matriz.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p>
<p>QP331</p> <p>Turma "A"</p>	<p>Espectroscopia Ótica Molecular</p> <p>Pré-Requisito: QP031/AA200</p> <p>Profa. Dra. Teresa Dib Zambon Atvars</p> <p>Ementa: Radiação. Simetria. Átomos e moléculas diatômicas. Rotações e vibrações moleculares. Espectroscopia eletrônica.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p>
<p>QP413</p> <p>Turma "V"</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Analítica I – "Quimiometria"</p> <p>Prof. Dr. Ronei Jesus Poppi</p> <p>Ementa: Introdução à quimiometria. Métodos de classificação não supervisionados e supervisionados. Calibração multivariada por mínimos quadrados clássico (CLS) e inverso (ILS). Regressão de componentes principais (PCR). Mínimos quadrados parciais (PLS). Seleção de variáveis em calibração multivariada. Análise de dados de ordem superior. Redes neurais. Algoritmos genéticos. Lógica difusa. Sistemas neuro-difusos e neuro-genéticos. Utilização de programas em linguagem MATLAB, relacionados aos tópicos do curso, para tratamento de dados químicos reais. Bibliografia: H. Martens e T. Naes, "Multivariate Calibration; D.L. Massart, B.G.M. Vandeginste, S.N. Deming, Y. Michotte, L.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 30</p>

	Kaufman, "Chemometrics: a textbook; J. Zupan e J. Gasteigner, "Neural Networks for Chemists".	
QP433 Turma "V"	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química I</p> <p>"Morfologia, Morfogênese e Microquímica"</p> <p>Prof. Dr. Fernando Galembeck</p> <p>Ementa: Estruturas em equilíbrio (auto-ordenamento); estruturas fora de equilíbrio (não-linearidade). Separação de fases: termodinâmica e cinética. Fatores de morfogênese: tensão superficial e interfacial; estrutura e hábito cristalinos; microquímica de interfaces. Microscopias, microssondas, espalhamento, refletância e elipsometria.</p>	<p>Crédito: 12</p> <p>VAGAS</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p>
P434 Turma "V"	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química II</p> <p>"A Equação de Schrödinger: Soluções Numéricas"</p> <p>Prof. Dr. Rogério Custodio</p> <p>Pré-Requisito: Conhecimento básico de Unix e Fortran.</p> <p>Ementa: Introdução aos métodos de Monte Carlo: númeos aleatórios, amostragem de metrópolis e integração através do método de Monte Carlo. Método Monte Carlo quântico variacional: determinação de valores esperados, utilização de funções guia, critérios de otimização. A técnica de difusão através do método Monte Carlo quântico: o formalismo das funções de Green, método de difusão puro, métodos de funções de Green exatos. Tratamento de férmions: funções de onda tentativa, o método dos nós fixos, o método dos nós flutuantes. Cálculo de propriedades eletrônicas através do método Monte Carlo quântico. Outras técnicas numéricas convencionais para resolver a equação de Schrödinger: método das condições de contorno, métodos matriciais, método de Numerov, a correção de Cooley. Bibliografia: B.L. Hammond, W.A. Lester and P.J. Reynolds, "Monte Carlo methods in ab initio quantum chemistry". Outras referências a serem apresentadas durante o curso.</p>	<p>Créditos: 06</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p>

<p>QP446</p> <p>Turma "V"</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica IV</p> <p>"Nanosistemas e Nanotecnologia – Um Enfoque Químico" -</p> <p>Prof. Dr. Oswaldo Luiz Alves</p> <p>Ementa: 1.Aspectos gerais de sistemas mesoscópicos. 2.Apresentação das concepções básicas da nanotecnologia. 3.Aplicação dos conceitos de nanotecnologia em diferentes áreas da química. 4.Exemplos de casos. 5.Avaliação do impacto da nanotecnologia do ponto de vista científico e tecnológico. Perspectivas de curto prazo. Bibliografia: A ser fornecida pelo Professor.</p>	<p>Créditos: 06</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p>
<p>QP463</p> <p>Turma "A"</p>	<p>Computação em Química</p> <p>Prof. Dr. Pedro Antônio Muniz Vazquez</p> <p>Ementa: Noções de linguagem de programação e do sistema de dados. Prática supervisionada de utilização dos terminais, de preparação e de execução de programas de interesse químico.</p>	<p>Créditos: 06</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p>
<p>QP464</p> <p>Turma "V"</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Interdisciplinar II</p> <p>"Estabilização e Degradação de Polímeros"</p> <p>Prof. Dr. Marco-Aurelio De Paoli</p> <p>Ementa: Introdução geral. Tipos de reações de degradação. Métodos usados para acompanhar os processos de degradação. Iniciação do processo de degradação. Estabilizantes e mecanismos de estabilização. Biodegradação e polímeros biodegradáveis. Estratégias alternativas, pirólise, reciclagem e meio ambiente.</p>	<p>Créditos: 06</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p>

<p>QP521</p> <p>Turma "A"</p>	<p>Introdução à RMN de Carbono-13</p> <p>Pré-Requisito: QP-222/AA200</p> <p>Profa. Dra. Anita Jocelyne Marsaioli</p> <p>Ementa: O experimento de RMN através de pulsos com transformada de Fourier: princípios e técnicas. Aplicações: RMN de carbono-13, deutério, oxigênio-17 e alumínio-27. Introdução à RMN bidimensional. Noções de RMN de sólidos e obtenção de imagens (tomografia).</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p>
<p>QP663</p> <p>Turma "V"</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Interdisciplinar I</p> <p>"Quimiometria – Análise Multivariada de Dados Experimentais em Química"</p> <p>Profa. Dra. Marcia Miguel Castro Ferreira</p> <p>Ementa: Análise multivariada. Introdução: definição do problema, organização dos dados, validação dos dados, visualização dos dados originais, transformação/processamento dos dados. Análise Exploratória dos dados: PCA - análise de componentes principais. HCA - análise hierárquica de agrupamentos. Construção de modelos de calibração: PCR - regressão por componentes principais. PLS – regressão por mínimos quadrados parciais. Construção de modelos de classificação (reconhecimento de padrões): KNN, SIMCA. Visualização com os dados processados, validação de modelos, uso de modelos para previsões. Análise de dados de ordem superior (obtidos com instrumentos hifenados). Aplicações de acordo com o interesse dos alunos. Objetivo: Dar uma visão geral dos métodos multivariados de análise de dados e mostrar suas aplicações em diferentes problemas químicos. Os conceitos básicos serão apresentados e os alunos terão a oportunidade de analisar no micro computador, vários conjuntos de dados (incluindo espectroscopia, cromatografia) com programas atuais.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p>

<p>QP812</p> <p>Turma "V"</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Analítica VIII</p> <p>"Recursos Didáticos Experimentais"</p> <p>Profas. Dras. Adriana Vitorino Rossi e Solange Cadore</p> <p>Ementa: Serão discutidas questões que fundamentam a utilização da experimentação como estratégia de ensino nos cursos de graduação de química. Os alunos desenvolverão projetos para elaboração de experimentos para disciplinas de graduação dos cursos de química.</p>	<p>Créditos: 06</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p>
<p>QP935</p> <p>Turma "V"</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química XI</p> <p>"Física de Polímeros"</p> <p>Profa. Dra. Maria Isabel Felisberti</p> <p>Ementa: Mecanismos de relaxações em polímeros. Modelos fenomenológicos. Transições de fase. Elasticidade da borracha. Soluções poliméricas. Difusão. Morfologia. Programa: 1.Conformações de cadeias poliméricas. 2.Relaxações em polímeros. Relaxação de tensão e fluência. Modelos fenomenológicos: modelo de Maxwell, moelo Kevin-Voigt, modelo dos quatro elementos, modelo de Takanayagi. Espectro de relaxação. Modelos de relaxação molecular. 3.Transição vítrea. Descrição termodinâmica. Teoria do volume livre. Relação WLF (Williams, Landel e Ferry). Princípio de superposição tempo-temperatura. Relaxações secundárias. Fatores que secundárias. Fatores que afetam a transição vítrea. 4.Cristalização e fusão. Comportamento de cristalização: formas cristalinas, nucleação e crescimento. Comportamento de fusão: equilíbrio termodinâmico. Influência da composição química sobre a temperatura de fusão. 5.Elasticidade da borracha. Termodinâmica da elasticidade. Teoria estatística. 6. Morfologia. Sistemas multicomponentes; copolímeros, blendas, IPN's.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p>