

## DISCIPLINAS OFERECIDAS NO 1º SEMESTRE/2001

|                                      |  |   |
|--------------------------------------|--|---|
| <p><b>QP171</b></p> <p>Turma "A"</p> | <p><b>Dissertação de Mestrado</b></p>  | <p>Créditos: 104</p>  |
| <p><b>QP181</b></p> <p>Turma "A"</p> | <p><b>Tese de Doutorado</b></p>  | <p>Créditos: 256</p>  |
| <p><b>QP021</b></p> <p>Turma "A"</p> | <p><b>Química Orgânica Avançada</b></p> <p>Prof. Dr. Antonio Cláudio Herrera Braga</p> <p><b>Ementa:</b> Mecanismos de reações, estereoquímica. Reações eletrocíclicas. Reações de cicloadição e de cicloeverção. Reações sigmatrópicas. Reações lineares de energia livre. Migrações em centros deficientes eletronicamente. Reações de substituição nucleofílica, efeitos de grupos vizinhos e cátions não-clássicos. Adições polares e reação de eliminação. Carbânions, outras espécies de carbono nucleofílico. Carbenos, carbenóides e nitrenos. Reações de radicais livres.</p> | <p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 05</p> <p>máximo: 25</p> |
| <p><b>QP031</b></p> <p>Turma "A"</p> | <p><b>Química Quântica I</b></p> <p>Prof. Dr. Nelson Henrique Morgon</p> <p><b>Ementa:</b> Mecânica ondulatória. Operadores e relações de incerteza. Momento angular. Potenciais esfericamente simétricos. Átomo multieletrônico. Álgebra matricial. Métodos de aproximação. Spin. Estrutura atômica. Método SCF de Hartree-Fock.</p>  | <p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p> |
| <p><b>QP399</b></p> <p>Turma "C"</p> | <p><b>Tópicos Especiais em Físico-Química IX</b></p> <p>"Introdução à Mecânica Estatística e Simulação Computacional"</p> <p>Prof. Dr. Munir Salomão Skaf</p> <p><b>Ementa:</b> 1. Introdução aos princípios básicos da Mecânica Estatística. a) O que é e para que serve. b) Microestados, configurações e ensembles: A entropia é desvendada. c) A configuração mais provável, o máximo da entropia e a distribuição de Boltzmann. d)</p>  | <p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 02</p> <p>máximo: 10</p> |

|  |   |   |
|--|---|---|
|  | <p>Funções de partição e flutuações: A conexão com a termodinâmica. 2. Revisão das mecânicas clássica e quântica. a) Formulações de Newton, Lagrange e Hamilton (mec. clássica). b) Mecânica de muitos corpos e dinâmica de corpos rígidos (mec. clássica). c) Estados quânticos e quantização da energia (mec. quântica). d) Partícula livre, osciladores, rotores livres (quântico vs. clássico). 3. Mecânica Estatística de Partículas Independentes. a) Gases ideais: Distribuição de Maxwell-Boltzmann. b) Gases ideais poliatômicos: Aplicação à espectroscopia. c) Equilíbrio químico: Uma visão microscópica. d) O Princípio de Pauli afeta a distribuição de energia de um sistema: Estatísticas de Fermi-Dirac e Bose-Einstein. e) Sólidos cristalinos ideais, radiação de corpo negro. 4. Mecânica Estatística de Partículas Interagentes. a) Gases imperfeitos, teoria de van der Waals. b) Potenciais intermoleculares de interação. c) O estado líquido da matéria. d) Funções de distribuição: Caracterização da estrutura de líquidos. e) Teoria de perturbação em líquidos. f) Soluções iônicas: Fundamentos microscópicos da teoria de Debye-Huckel. g) Propriedades de transporte e dinâmica molecular: Funções de correlação temporal. h) Processos de relaxação coletivos: Relaxação dielétrica e espalhamento de luz. 5. Métodos Computacionais para o Estudo de Fases Condensadas. a) O método de Monte Carlo. b) O método da Dinâmica Molecular. c) Diferenças e semelhanças entre MC e MD. d) Algoritmos e técnicas avançadas de MD: Sistemas moleculares rígidos e flexíveis. e) Líquidos polares e tratamento de forças de longo alcance. f) Exemplos clássicos: Água, metanol, acetonitrila, DMSO e CCl<sub>4</sub>: Termodinâmica, estrutura, dinâmica e propriedades de solvatação.</p> |   |
| <p><b>QP413</b><br/><br/>Turma "C"</p> | <p><b>Tópicos Especiais em Química Analítica I</b></p> <p>"Bioanalítica: Química Farmacêutica e Clínica"</p> <p>Profs. Drs. Susanne Rath e Lauro Tatsuo Kubota</p> <p><b>Ementa:</b> (i) Introdução à farmacologia; (ii) Controle e qualidade de fármacos; (iii) Introdução a análise clínica; (iv) Métodos analíticos instrumentais empregados na determinação de princípios ativos e</p>  | <p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 10</p> |

|                                   |  |   |
|-----------------------------------|--|---|
|                                   | <p>metabólitos em fluidos biológicos; (v) Automação em análises clínicas. Programa: Princípios farmacocinéticos; princípios farmacodinâmicos; Biotransformação de drogas; Desenvolvimento de novas drogas; Controle e qualidade de fármacos; Ensaio de identificação; Análise quantitativa; Desenvolvimento e validação de metodologias analíticas; Métodos espectroanalíticos, eletroanalíticos e de separação empregados na determinação de princípios ativos e principais metabólitos em fluidos biológicos e Automação na análise clínica.</p>   |   |
| <p><b>QP414</b><br/>Turma "C"</p> | <p><b>Tópicos Especiais em Química Analítica II</b></p> <p>"Química Aquática"</p> <p>Profs. Drs. Wilson de Figueiredo Jardim e Anne Hélène Fostier</p> <p><b>Ementa:</b> PARTE TEÓRICA - Introdução: ciclo da água, composição química das águas naturais, águas subterrâneas e águas superficiais, água doce e água salgada. Acidez das águas: sistemas abertos e sistemas fechados: CO<sub>2</sub>/HCO<sub>3</sub>/CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>. Interface água-atmosfera: trocas nesta interface, modelos, exemplos de cálculos. Química dos metais em água: transporte, tempo de residência, complexação, adsorção e suas implicações. Química redox em água: diagrama pE-pH e suas interpretações ambientais. PARTE PRÁTICA - Determinação de CO<sub>2</sub> em águas por titulação e por FIA, comparação e discussão dos resultados. Cálculos do fluxo de CO<sub>2</sub> na interface água atmosfera usando câmara estática. Especificação de metais em sedimentos: papel do potencial redox.</p> | <p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 16</p> |
| <p><b>QP425</b><br/>Turma "C"</p> | <p><b>Tópicos Especiais em Química Orgânica III</b></p> <p>"Chemical Synthesis of Bioactive Natural Products"</p> <p>Profs. Drs. Anita Jocelyne Marsaioli e Kenji Mori (Universidade de Ciências de Tóquio)</p> <p><b>Ementa:</b> Introduction. What are biofunctional molecules. Why synthesize biofunctional molecules. How to we synthesize biofunctional molecules. ATENÇÃO: ESSA DISCIPLINA REFERE-SE AO CURSO - "Chemical Synthesis of Bioactive Natural</p>   | <p>Créditos: 03</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 05</p> <p>máximo: 25</p> |

|                               |  |   |
|-------------------------------|--|---|
|                               | Products", ministrado pelo Prof. Kenji Mori, no período de 28 a 31/08/2000. Somente os alunos que participaram do curso e fizeram a prova poderão matricular-se.   |   |
| <b>QP433</b><br><br>Turma "C" | <p><b>Tópicos Especiais em Físico-Química I</b></p> <p>"Física de Polímeros"</p> <p>Profa. Dra. Maria Isabel Felisberti</p> <p><b>Ementa:</b> 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> |
| <b>QP436</b><br><br>Turma "C" | <p><b>Tópicos Especiais em Físico-Química IV</b></p> <p>"Tecnologia da Lacase, Origem, Propriedades, Produção, Purificação e Aplicações"</p> <p>Profs. Drs. Nelson Eduardo Durán Caballero e Liliana Gianfreda (Universidade de Nápoles)</p> <p><b>Ementa:</b> a) Origem e distribuição de lacases; b) Propriedades das lacases; c) Papel na natureza de lacases; d) Produção pela adição de indutores, isolamento e purificação de lacases; e) Aplicação ambiental e não ambiental das lacases; f) Uso de</p>   | <p>Créditos: 03</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p> |

|  |  |   |
|--|--|---|
|  | <p>lacases imobilizadas e aspectos futuros das mesmas.<br/> <b>ATENÇÃO:</b> ESSA DISCIPLINA REFERE-SE AO CURSO - "Tecnologia da Lacase, Origem, Propriedades, Produção, Purificação e Aplicações", ministrado pela Profa. Dra. Liliana Gianfreda, no período de 25 a 29/09/2000. Somente os alunos que participaram do curso poderão matricular-se.</p>  |   |
| <p><b>QP443</b><br/><br/>Turma "C"</p> | <p><b>Tópicos Especiais em Química Inorgânica I</b><br/><br/>"Zeólitos e Peneiras Moleculares"<br/><br/>Profa. Dra. Heloise de Oliveira Pastore</p> <p><b>Ementa:</b> 1. Ocorrência geológica e formação natural. 2. Desenvolvimento da síntese de zeólitos e peneiras moleculares. (a) zeólitos X e Y; (b) zeólitos altamente silícicos; (c) peneiras moleculares: aluminofosfatos; (d) peneiras moleculares mesoporosas. 3. Métodos sintéticos de preparação de zeólitos e peneiras moleculares micro e mesoporosas. (a) alcalinidade; (b) diluição; (c) razão molar direcionador/sílica; (e) outros parâmetros sintéticos. 4. Precursores silícicos. (a) diversidade de espécies, sua caracterização e função na determinação da estrutura. 5. Métodos físicos de caracterização de zeólitos e peneiras moleculares. 6. Reações modelo. 7. Catálise e aplicações incomuns. 8. Aplicação em reações orgânicas.</p> | <p>Créditos: 12<br/><br/>VAGAS:<br/><br/>mínimo: 02<br/><br/>máximo: 20</p> |
| <p><b>QP444</b><br/><br/>Turma "C"</p> | <p><b>Tópicos Especiais em Química Inorgânica II</b><br/><br/>"Química de Organometálicos"<br/><br/>Prof. Dr. Gilson Herbert Magalhães Dias</p> <p><b>Ementa:</b> Introdução e histórico. Nomenclatura. Aspectos teóricos sobre a natureza eletrônica das ligações e de estruturas: noções de simetria; campo cristalino (CC) e orbital molecular (OM); efeitos relativísticos nos AO e OM; regra dos 18 elétrons; analogia isolobal; estado de oxidação formal; modelo da ligação doação-retrodoação; ligação metal-metal. Classificação de organometálicos em relação aos: ligantes; comparativa entre centros metálicos das séries de transição 3d, 4d e 5d; tipos de ligação. Reações térmicas e fotolíticas: métodos e estratégias sintéticas; classificação das reações; tendências de</p>   | <p>Créditos: 12<br/><br/>VAGAS:<br/><br/>mínimo: 03<br/><br/>máximo: 20</p> |

|                                   |   |  |
|-----------------------------------|---|--|
|                                   | <p>reatividade; ativação e transformação orgânica de moléculas coordenadas. Características, propriedades e aplicações específicas de: complexos homolépticos; livres de ligantes; coordenação insaturada; exometalfulerenos; reações de catálise homogênea. Cluster: peculiaridades; construção e fragmentação. Técnicas de análise estrutural e eletrônica; espectroscopias vibracional, RMN multinuclear, eletrônica, Moessbauer e XAS.</p>  |  |
| <p><b>QP446</b><br/>Turma "C"</p> | <p><b>Tópicos Especiais em Química Inorgânica IV</b><br/>"Métodos Físicos e Caracterização de Materiais"<br/>Prof. Dr. Oswaldo Luiz Alves<br/><b>Ementa:</b> Princípios básicos, instrumentação e estudos de casos: Infravermelho Raman, Difratomia de Raios-X e EXAFS.</p>   | <p>Crédito: 06<br/>VAGAS<br/>mínimo: 03<br/>máximo: 20</p>   |
| <p><b>QP464</b><br/>Turma "C"</p> | <p><b>Tópicos Especiais em Química Interdisciplinar II</b><br/>"Dicroísmo Circular"<br/>Prof. Dr. Francisco Benedito Teixeira Pessine e Dr. Carlos Ramos (LNLS)<br/><b>Ementa:</b> Instrumentação. Teoria de CD em proteínas e em DNA. Determinação de estrutura secundária de proteínas. Estudos de cinética e fluorescência usando CD. CD vibracional e magnético. CD utilizando radiação síncrotron. Estudos sobre estabilidade e enovelamento de proteínas utilizando CD. <b>ATENÇÃO:</b> ESSA DISCIPLINA REFERE-SE AO CURSO - "Dicroísmo Circular", ministrado pelo Dr. Carlos Ramos (LNLS), no período de 19/09/2000 a 30/11/2000. Somente os alunos que participaram do curso e fizeram o relatório poderão matricular-se.</p> | <p>Créditos: 06<br/>VAGAS:<br/>mínimo: 03<br/>máximo: 30</p> |

|                                      |   |   |
|--------------------------------------|---|---|
| <p><b>QP663</b></p> <p>Turma "C"</p> | <p><b>Tópicos Especiais em Química Interdisciplinar I</b></p> <p>"Quimiometria - Análise Multivariada de Dados Experimentais em Química"</p> <p>Profa. Dra. Márcia Miguel Castro Ferreira</p> <p><b>Ementa:</b> 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. <b>Objetivo:</b> 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><b>QP822</b></p> <p>Turma "C"</p> | <p><b>Tópicos Especiais em Química Orgânica VIII</b></p> <p>"Teoria de Orbitais Moleculares"</p> <p>Prof. Dr. Luiz Carlos Dias</p> <p><b>Ementa:</b> Introdução a teoria de orbitais moleculares. Orbitais moleculares e orbitais de fronteira. Ligações sigma e teoria de interação de orbitais. Teoria de orbitais moleculares de Huckel. Reações iônicas. Reações de olefinas e propriedades. Intermediários reativos. Compostos carbonílicos. Reações de substituição nucleofílicas. Ligações de hidrogênio. Compostos aromáticos. Reações térmicas pericíclicas. Reações fotoquímicas.</p>   | <p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 05</p> <p>máximo: 25</p> |