

## DISCIPLINAS OFERECIDAS NO 1º SEMESTRE/2003

QP171 Turma "A"	<b>Dissertação de Mestrado</b>	Créditos: 104
QP181 Turma "A"	<b>Tese de Doutorado</b>	Créditos: 256
	<b>DISCIPLINAS PARA O PROGRAMA DE ESTÁGIO DOCENTE (PED)</b>	
QP309 Turmas "A/B"	<b>Programa de Estágio Docente I (Docência Plena)</b>	Créditos: 12
QP310 Turmas "A/B"	<b>Programa de Estágio Docente II (Apoio à Docência)</b>	Créditos: 09
QP363 Turma "A"	<b>Projetos de Cooperação</b> <b>Ementa:</b> Projetos de Cooperação interinstitucional. <b>ATENÇÃO: SOMENTE OS ALUNOS QUE FAZEM PARTE DO PROJETO PROCAD, PODERÃO MATRICULAR-SE.</b>	Créditos: 06
QP021 Turma "A"	<b>Química Orgânica Avançada</b> Prof. Dr. Antonio Cláudio Herrera Braga <b>Ementa:</b> Mecanismos de reações, estereoquímica. Reações eletrocíclicas. Reações de cicloadição e de cicloneversão. Reações sigmatrópicas. Relações lineares de energia livre. Migrações em centros deficientes eletronicamente. Reações de substituição nucleofílica, efeitos de grupos de 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.	Créditos: 12 VAGAS: mínimo: 03 máximo: 25
QP222 Turma "A"	<b>Métodos Físicos em Química Orgânica</b> Profs. Drs. Anita J. Marsaioli ( <b>Coordenadora</b> ) e Marcos Nogueira Eberlin <b>Ementa:</b> 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: 25

<p><b>QP314</b></p> <p>Turma "A"</p>	<p><b>Métodos Analíticos Aplicados à Determinação de Traços</b></p> <p>Profs. Drs. Solange Cadore (Coordenadora) e Nivaldo Baccan</p> <p><b>Ementa:</b> 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><b>QP317</b></p> <p>Turma "A"</p>	<p><b>Instrumentação e Automação em Química Analítica</b></p> <p>Profs. Drs. Jarbas J. R. Rohwedder (<b>Coordenador</b>), Ivo Milton Raimundo Jr e Célio Pasquini</p> <p><b>Ementa:</b> Conceitos de mecanização, automação e robotização. Métodos discretos, contínuos e por injeção em fluxo. O papel do microcomputador.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 25</p>
<p><b>QP399</b></p> <p>Turma "G"</p>	<p><b>Tópicos Especiais em Físico-Química IX</b></p> <p>"Relações entre Estrutura e Propriedade/Reatividade/Atividade Biológica"</p> <p>Profa. Dra. Márcia M. C. Ferreira</p> <p><b>Ementa:</b> Análise Multivariada: Introdução: Análise exploratória dos dados: PCA – análise de componentes principais. HCA – análise hierárquica de agrupamentos. Construção de modelos de regressão: PCR – regressão por componentes principais. PLS – regressão por mínimos quadrados parciais. Construção de modelos de classificação (reconhecimento de padrões): KNN, SIMCA. Química Estrutural e Teórica: Parâmetros estruturais de átomos, moléculas pequenas e macromoléculas. Análise conformacional estrutural. Simetria molecular e estereoquímica. Pontes de hidrogênio. Interações intra- e intermoleculares. Complexos moleculares. Simetria cristalina. Empacotamento cristalino. Banco de dados cristográficos. Breve revisão das teorias aplicadas em química teórica, computacional e estrutural. Introdução à teoria dos grafos. Uso de dados estruturais em química teórica. Análise conformacional e computacional. Otimização de geometria de complexos moleculares. QSAR/QSPR: Quantidades em (Q)SAR/(Q)SPR. Descritores moleculares globais e locais. Descritores de complexos moleculares e de empacotamento cristalino. Descritores de reatividade e propriedades magnéticas. Metodologia de (Q)SAR/(Q)SPR.QSAR-3D. Técnicas de visualização de moléculas, complexos moleculares, densidade eletrônica e empacotamento cristalino. Molecular graphics a nível qualitativo e quantitativo. Princípios básicos de modelagem molecular. Docking. Farmacóforos.</p>	<p>Créditos:12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 25</p>
<p><b>QP413</b></p> <p>Turma "G"</p>	<p><b>Tópicos Especiais em Química Analítica I</b></p> <p>"Bioanalítica: Química Farmacêutica e Clínica"</p> <p>Profs. Drs. Lauro Tatsuo Kubota (<b>Coordenador</b>) e Susanne Rath</p> <p><b>Ementa:</b> Princípios farmacocinéticos; Princípios farmacodinâmicos; Biotransformação de drogas; Desenvolvimento de novas drogas; Controle e qualidade de fármacos; Ensaios de identificação; Análise quantitativa; Desenvolvimento e validação de metodologias analíticas; Métodos espectroanalíticos, eletroanalíticos e de</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p>

	separação empregados na determinação de princípios ativos e principais metabólitos em fluidos biológicos e Automação na análise clínica.	
<b>QP423</b> Turma "G"	<p><b>Tópicos Especiais em Química Orgânica I</b> "Química Medicinal: Mecanismos de Ação e Síntese de Fármacos"</p> <p>Prof. Dr. Fernando Antonio S. Coelho</p> <p><b>Ementa:</b> 1. Objetivos e Critérios. Introdução à Química Medicinal. Aspectos Gerais, Características da área. 2. Descoberta, Desenho e Desenvolvimento de Medicamentos; 3. Principais Mecanismos de Ação dos Fármacos: Características Gerais das Células. Estrutura das Proteínas. Teoria dos Receptores. Principais Grupos de Receptores; 4. Noções Básicas de Estudo Quantitativos da Relação Estrutura-Atividade (QSAR). Principais modificações estruturais. 5. Principais classes de fármacos: Agentes antibacterianos: Mecanismos de ação e Síntese; Agentes antiinflamatórios: mecanismos de ação e síntese; Fármacos que agem sobre o SNC e sistema nervoso autônomo; Principais classes e síntese; Agentes antivirais: Mecanismos de ação e Síntese; Agentes antimalariais: Mecanismo de ação e síntese; Fármacos que agem sobre o controle de pressão sanguínea; Mecanismos de ação e Síntese; Agentes antidiabéticos; Mecanismo de ação e Síntese.</p>	Créditos: 12 VAGAS: mínimo: 3 máximo: 30
<b>QP433</b> Turma "G"	<p><b>Tópicos Especiais em Físico-Química I</b> "Mecânica Estatística"</p> <p>Prof. Dr. Munir S. Skaf</p> <p><b>Ementa:</b> 1. Revisão dos conceitos básico da mecânica estatística de equilíbrio. 2. Funções de correlação temporais e equação de Liouville. 3. Teoria de resposta linear, formalismo de Green-Kubo e relação entre variáveis dinâmicas e observáveis experimentais. 4. Aplicações: espalhamento dinâmico de luz, espalhamento Raman, relaxação dielétrica, coeficientes de transporte, espalhamento dinâmico de nêutrons, óptica não-linear (sistemas com interfaces). 5. Tópicos especiais: formulação de Feynman da Mecânica Estatística Quântica (Path Integral MD), teoria do fluxo reativo, amostragem de caminho pelo estado de transição.</p>	Créditos: 12 VAGAS: mínimo: 03 máximo: 20
<b>QP443</b> Turma "G"	<p><b>Tópicos Especiais em Química Inorgânica I</b> "Catálise Heterogênea"</p> <p>Profs. Drs. Ulf F. Schurhardt (Responsável) e Jorge Humberto Sepúlveda Flores</p> <p><b>Ementa:</b> Conceitos gerais em catálise: Catalisador, atividade e seletividade catalítica. Fenômeno de adsorção: Gás-Sólido; Isotermas da adsorção: equação B.E.T. Engenharia de Reação Química: Tipos de reatores; reações sobre catalisadores porosos. Fator de Efetividade. Modelos Cinéticos: Hougen-Watson; Langmuir-Hinshelwood. Princípios sobre preparação de</p>	Créditos: 12 VAGAS: mínimo: 03 máximo: 15

	<p>catalisadores. Caracterização de catalisadores sólidos. Técnicas de fluxo: Desorção Térmica Programada de NH<sub>3</sub>; Piridina; H<sub>2</sub> : CO ; CO<sub>2</sub>. etc. Redução à Temperatura Programada. Técnicas Espectroscópicas: Infra-Vermelho; Difração de Raios-X; Espectroscopia Fotoeletrônica de Raios-X (XPS); Espectroscopia de absorção de Raios-X para estruturas finais distantes (EXAFS).</p>	
<p><b>QP444</b> Turma "G"</p>	<p><b>Tópicos Especiais em Química Inorgânica II</b> "Química Inorgânica à Luz da Energia"</p> <p>Prof. Dr. Claudio Airoidi</p> <p><b>Ementa:</b> Trocas de energia em Química Inorgânica. Energética de íons, átomos gasosos, cristais iônicos e compostos em solução. Interação metal-ligante em adutos e quelatos. Ligação metal-carbono e energia média de ligação. Correlação de parâmetros termoquímicos. Polímeros inorgânicos. Titulação calorimétrica. Sistema de cálculos de grandezas termodinâmicas. Energética em sistemas heterogêneos. Termoquímica da interação fungicida-herbicida no solo.</p>	<p>Créditos: 12 VAGAS: mínimo: 03 máximo: 20</p>
<p><b>QP446</b> Turma "G"</p>	<p><b>Tópicos Especiais em Química Inorgânica IV</b> "Uma Introdução a Métodos Avançados de Preparação de Materiais"</p> <p>Prof. Dr. Oswaldo Luiz Alves</p> <p><b>Ementa:</b> Concepções gerais sobre a preparação de materiais. Métodos de fusão/resfriamento. Método Sol-gel. Método de Decomposição de Precursores. Deposição Química de Vapor (CVD). Métodos de preparação de nanopartículas metálicas e de semicondutores. Reações "Template" para controle de microestruturas. Noções básicas de engenharia de cristais.</p>	<p>Créditos: 06 VAGAS: mínimo: 03 máximo: 20</p>
<p><b>QP649</b> Turma "G"</p>	<p><b>Tópicos Especiais em Química Inorgânica IX</b> "Equilíbrio de Solução: Descrição Quantitativa e Simulação Computacional"</p> <p>Profs. Drs. Yoshitaka Gushikem (<b>Responsável</b>) Yury V. Kholin (Universidade Nacional V. N. Karazin, Kharkov, Ucrânia)</p> <p><b>Ementa:</b> O objetivo do curso é apresentar a análise físico-química como uma poderosa ferramenta na investigação do equilíbrio de complexações, na interface sólido-solução, em sistemas heterogêneos complexos. O método de análise físico-química quantitativa permite determinar a composição estequiométrica e constantes de estabilidade de espécies imobilizadas com base na dependência composição-propriedade. Tanto os fundamentos teóricos quanto os métodos computacionais serão considerados e uma grande atenção será devotada à análise de dados experimentais reais com o auxílio de métodos gráficos simples e funções auxiliares. Os estudantes também terão a oportunidade de interagir e aprender a usar um programa moderno que possibilita explorar equilíbrio de quimiossorção em sistemas complexos. A influência da heterogeneidade energética dos processos complexos</p>	<p>Créditos: 03 VAGAS: mínimo: 01 máximo: 25</p>

	também será discutida. <b>ATENÇÃO: ESSA DISCIPLINA REFERE-SE AO CURSO: “EQUILÍBRIO DE COMPLEXAÇÕES NA INTERFACE DE SISTEMAS HETEROGÊNEOS, SÓLIDO-SOLUÇÃO: DESCRIÇÃO QUANTITATIVA E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL”.</b> SOMENTE OS ALUNOS QUE FIZERAM O CURSO PODERÃO MATRICULAR-SE.	
QP812 Turma “G”	<p><b>Tópicos Especiais em Química Analítica VIII</b>  “Espectroscopia no Infravermelho Próximo: Fundamentos, Aspectos Práticos e Aplicações Analíticas”</p> <p>Prof. Dr. Celio Pasquini</p> <p><b>Ementa:</b> Fundamentos de espectroscopia vibracional. Osciladores harmônicos e anarmônicos. Aspectos históricos. Absorção. Espectroscopia na região do infravermelho próximo. Espalhamento Raman. Espectrofotômetro infravermelho próximo. Formas de medidas espectrais. Espectros de transmitância, absorbância e reflectância difusa. Técnicas quimiométricas usuais empregadas no tratamento de dados espectrais no infravermelho. Análise qualitativa e quantitativa. Exemplos de aplicações nas áreas: agrícola, polímeros, farmacêutica, clínica, petroquímica e combustíveis. Prática 1: Identificação de princípios ativos de medicamentos. Prática2: Determinação de umidade em farinha de trigo.</p>	Créditos: 06 VAGAS: mínimo: 03 máximo: 25
QP832 Turma “G”	<p><b>Tópicos Especiais em Físico-Química VIII</b>  “Introdução à Ciência de Polímeros”</p> <p>Profs. Drs. Maria I. Felisberti (<b>Coordenadora</b>), Fernando Galembeck e Maria do Carmo Gonçalves</p> <p><b>Ementa:</b> Introdução. I.1 Polímeros: Definição e Origem. I.2 Massa Molar. I.3 Configuração e Conformação. II Síntese. II.1 Poliadição. II.2 Policondensação. II.3 Polimerização Iônica. II.4 Polimerização por Coordenação. II.5 Reações de Polímeros, Modificação, Enxertia. II.6 Reticulação e Degradação. II.7 Processos de fabricação industrial de polímeros. III. Estado e suas Características. III.1 Estado Líquido. III.2 Estado Elástico. III.3 Estado Vítreo, Transição Vítreo. III.4 Estado Cristalino. IV. Transições de fase. IV.1 Fusão. IV.2 Cristalização. V. Propriedades de polímeros. V.1 Propriedades Mecânicas. V.2 Difusão e Permeação. V.3 Propriedades Elétricas. V.4 Propriedades Ópticas. V.5 Propriedades Térmicas. V.6 Propriedades de Superfícies e Adesão. V.7 Solubilidade. VI Misturas de Polímeros: Copolímeros, Blendas, Redes.</p>	Créditos: 12 VAGAS: mínimo: 03 máximo: 20
QP839 Turma “G”	<p><b>Tópicos Especiais em Físico-Química VII</b>  “Métodos para Estudos de Correlação Eletrônica em Moléculas”</p> <p>Profs. Drs. Nelson H. Morgon Antonio e Antonio Carlos Borin (IQ/USP)</p> <p><b>Ementa:</b> Correlação eletrônica e o método de interação de configurações; teoria de perturbação; coupled cluster; métodos de multireferência; dissociação molecular e o método MCSCF; métodos combinados; métodos diretos. Aplicações destes métodos em problemas específicos através de uso de programas</p>	Créditos: 12 VAGAS: mínimo: 03 máximo: 25

	computacionais.	
--	-----------------	--