

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA
PÓS-GRADUAÇÃO**

DISCIPLINAS OFERECIDAS NO 1º SEMESTRE/2007

QP171 Turma "A"	Dissertação de Mestrado	Créditos: 104
QP181 Turma "A"	Tese de Doutorado	Créditos: 256
	DISCIPLINAS PARA O PROGRAMA DE ESTÁGIO DOCENTE (PED)	
QP309 Turmas "A/B"	Programa de Estágio Docente I (Docência Plena)	Créditos: 12
QP310 Turmas "A/B"	Programa de Estágio Docente II (Apoio à Docência)	Créditos: 09
QP363 Turma "A"	Projetos de Cooperação Ementa: Projetos de Cooperação Interinstitucional. ATENÇÃO: SOMENTE OS ALUNOS QUE FAZEM PARTE DO PROJETO PROCAD, PODERÃO MATRICULAR-SE.	Créditos: 06
QP021 Turma "A" Terça e Quinta 16h às 18h Sala: IQ-14	Química Orgânica Avançada Prof(a)s. Dr(a)s. Anita Jocelyne Marsaioli e Carlos Roque Duarte Correia Ementa: Mecanismos de reações, estereoquímica. Reações eletrocíclicas. Reações de cicloadição e de cicloversão. 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 reações de eliminação. Carbânions, outras espécies de carbono nucleofílico. Carbenos, carbenóides e nitrenos. Reações de radicais livres.	Créditos: 12 VAGAS: mínimo: 05 máximo: 20
QP124 Turma "A" Terça e Quinta 14h às 16h Sala: IQ-14	Introdução à Química Quântica e Espectrometria Profs. Drs. Pedro Antonio Muniz Vazquez e Yuji Takahata Ementa: Ondas de matéria em sistemas simples. Partículas em campos de potencial variável, transições. Estrutura de átomos. A ligação química de moléculas simples. Moléculas diatômicas.	Créditos: 12 VAGAS: mínimo: 03 máximo: 30

<p>QP125 Turma "A"</p> <p>Terça 08h às 10h</p> <p>Quinta 10h às 12h</p> <p>Sala: IQ-14</p>	<p>Introdução à Termodinâmica e à Cinética</p> <p>Profs. Drs. Renato Atílio Jorge e Marcelo Ganzarolli de Oliveira</p> <p>Ementa: Leis da Termodinâmica, Conceito microscópico de entropia e a distribuição de Boltzmann, Funções de Estado e potencial químico, Equilíbrio de fases, Equilíbrio químico, Equilíbrio de soluções eletrolíticas, Teoria de Debye-Huckel e extensões. Leis de velocidade e mecanismos de reações, Elementos de Teoria cinética dos gases, Colisões, Fenômenos de Transporte, Dinâmica de Reações e superfícies de potencial, Teoria do estado de transição, Elementos de cinética de reações em solução.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS: mínimo: 01 máximo: 40</p>
<p>QP222 Turma "A"</p> <p>Segunda e Quinta 10h às 12h</p> <p>Sala: IQ-15</p>	<p>Métodos Físicos em Química Orgânica</p> <p>Prof. Dr. Roberto Rittner Neto</p> <p>Ementa: Espectroscopia no infravermelho. Espectrometria de ressonância magnética nuclear. Espectroscopia no ultravioleta. Espectrometria de massas. Utilização conjunta das diversas técnicas.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 20</p>
<p>QP227 Turma "A"</p> <p>Terça 08h às 12h</p> <p>Sala: IQ-15</p>	<p>Fundamentos de Química Analítica</p> <p>Prof(a)s. Dr(a)s. Wilson de Figueiredo Jardim, Anne Hélène Fostier, Celio Pasquini, Ivo Milton Raimundo Júnior e Ronei Jesus Poppi</p> <p>Ementa: Equilíbrio Químico. Íons em Solução. Teoria de Titulações. Seleção de Métodos Analíticos. Estatística aplicada à Química Analítica.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 30</p>
<p>QP232 Turma "A"</p> <p>Segunda e Sexta 16h às 18h</p> <p>Sala: IQ-14</p>	<p>Química Quântica II</p> <p>Profs. Drs. Nelson Henrique Morgon e Rogério Custodio</p> <p>Ementa: Método SCF de Hartree-Fock para camada aberta. Cálculos moleculares. Métodos NDO. Cálculos "ab initio" gaussianos. Teoria de correlação: Interação de configuração, "coupled cluster" e métodos de perturbação.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS: mínimo: 03 máximo: 30</p>
<p>QP314 Turma "A"</p> <p>Terça e Sexta 16h às 18h</p> <p>Sala: IQ-15</p>	<p>Métodos Analíticos Aplicados à Determinação de Traços</p> <p>Prof(a)s. Dr(a)s. Solange Cadore, Celio Pasquini, Lauro Tatsuo Kubota e Maria Izabel Maretti Silveira Bueno</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: mínimo: 05 máximo: 25</p>

<p>QP433 Turma "O"</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química I "Técnicas de Computação e Programação em Química"</p> <p>Prof. Dr. Pedro Antonio Muniz Vazquez</p> <p>Ementa: Gerenciamento de projetos de software com CVS; Linguagens de programação bash, perl e python; Linguagens de programação científica estruturada C e Fortran; Estruturas de dados; Programação orientada a objetos; Introdução à linguagem C++ ; Análise de desempenho e otimização, programação em rede.</p> <p><u>ATENÇÃO:</u> ESTA DISCIPLINA REFERE-SE AO CURSO "Técnicas de Computação e Programação em Química", JÁ MINISTRADO. SOMENTE OS ALUNOS QUE FIZERAM O CURSO PODERÃO MATRICULAR-SE.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS: mínimo: 01 máximo: 04</p>
<p>QP434 Turma "O"</p> <p>Quinta 19h às 21h</p> <p>Sala: IQ-15</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química II "Controle Multivariado de Processos Químicos"</p> <p>Profa. Dra. Márcia Miguel Castro Ferreira</p> <p>Ementa: O monitoramento do estado de um processo químico ao longo do tempo é muito importante pois assim o operador é alertado quando o processo sofre qualquer alteração inesperada e pode tomar, a tempo, as devidas providências. Esta é uma disciplina destinada aos alunos que tem interesse em processos químicos da indústria e/ou de laboratórios. O objetivo da disciplina é ensinar como é feita a modelagem multivariada dos processos e como fazer o acompanhamento e a otimização dos mesmos ao longo do tempo.</p> <p><u>Introdução</u> Tipos de Processos Químicos: - CONTÍNUOS - operados em condições de "steady state" ou em condições dinâmicas. - POR BATELADAS</p> <p>Variáveis de Processo: - CONTROLADAS - (fluxo, temperatura, pH) - PASSIVAMENTE OBSERVADAS - (humidade, matéria prima) - INTERMEDIÁRIAS - (viscosidade, concentração de saída do reator1 que se torna variável de entrada no reator2).</p> <p>Modelagem Multivariada de Processos: Objetivos: 1- Entender as relações entre diferentes partes do processo 2- Manter o processo sob controle 3- Melhorar a qualidade do produto</p> <p>Controle de Processos: Cartas de controle: discute como a teoria de cartas de controle pode ser implementada de maneira multivariada. Cartas de controle de processos contínuos Cartas de controle de processos em bateladas. Uso de séries temporais no controle de processos. Aplicações: parte do tempo será gasto em aplicações REAIS da indústria ou de laboratório.</p>	<p>Créditos: 06</p> <p>VAGAS: mínimo: 03 máximo: 20</p>

<p>QP436 Turma "O"</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química IV "Fotoquímica e Fotofísica em Biomoléculas"</p> <p>Prof(a)s. Dr(a)s. Teresa Dib Zambon Atvars (Responsável) e Pedro Aramendia (Universidade de Buenos Aires-Argentina)</p> <p>Ementa: Estados eletrônicos em moléculas orgânicas, polímeros, proteínas e sondas biológicas. Será introdutório para estudantes formados em várias especialidades (médicos, biólogos, farmacêuticos e químicos), introdução aos processos de transferência de energia (FRET) em sistemas reais: polímeros e sistemas biológicos; técnicas experimentais tais como formas de medidas de espectros de luminescência; processos de transferência de energia e distinção entre os processos; cálculos do raio de Förster; técnicas de microscopias de fluorescência, incluindo confocal e focalizar vários exemplos.</p> <p>ATENÇÃO: ESTA DISCIPLINA REFERE-SE AO CURSO "Fotoquímica e Fotofísica em Biomoléculas", MINISTRADO NO PERÍODO DE 07 A 11 DE AGOSTO DE 2006. SOMENTE OS ALUNOS QUE FIZERAM O CURSO PODERÃO MATRICULAR-SE.</p>	<p>Créditos: 03</p> <p>VAGAS: mínimo: 03 máximo: 30</p>
<p>QP444 Turma "O"</p> <p>Quarta e Sexta 10h às 12h</p> <p>Sala: IQ-14</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica II "Fundamentos da Química Inorgânica Estrutural"</p> <p>Prof. Dr. Yoshitaka Gushikem</p> <p>Ementa:</p> <p>A. Estrutura do atomo</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Funções de onda do átomo de hidrogênio 2. Energia dos orbitais 3. Simetria dos orbitais 4. Átomos polieletrônicos 5. Estados eletrônicos <p>B. Conceitos de Teoria do Grupo</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Elementos e operações de simetria 2. Grupos pontuais 3. Representações das operações de simetria 4. Aplicações gerais da teoria de grupo <p>C. Modelo de Ligação de Valencia</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Fundamentos 2. Tratamento de Heitler-London 3. Conceito de ressonância 4. Hibridização <p>D. Orbitais moleculares</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Moléculas diatômicas homo- e heteronucleares 2. Simetria e "overlap" de orbitais 3. Aplicação da teoria de grupo na combinação de orbitais 4. Ligações sigma e pi 5. OM em compostos de coordenação: espectros eletrônicos d-d e transferência de carga 6. OM em compostos contendo elementos representativos 7. OM em organometálicos e carbonilo-metálicos <p>E. Estado sólido</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Estrutura de sólidos 2. Ligações covalentes em sólidos 	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS: mínimo: 03 máximo: 20</p>

<p>QP448 Turma "A"</p> <p>Segunda e Terça 10h às 12h</p> <p>Sala: IQ-14</p>	<p>Química do Estado Sólido I</p> <p>Prof. Dr. Oswaldo Luiz Alves</p> <p>Ementa: Simetria cristalina. Método de raios-x. Modelo de bandas (MB). Utilização do MB para explicação de propriedades de materiais. Modelo iônico imperfeito.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 20</p>
<p>QP812 Turma "O"</p> <p>Terça 10h às 12h</p> <p>Sala: F-10</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Analítica VIII "Espectrometria Atômica"</p> <p>Prof. Dr. Marco Aurélio Zezzi Arruda</p> <p>Ementa: Espectrometria de absorção atômica com chama e suas variantes: Princípios básicos. Dinâmica das chamas, equilíbrios em fase gasosa, mecanismos de atomização. Sistemas nebulizadores e processos de nebulização. Sistemas atomizadores. Interferências. Aplicações. Espectrometria de absorção atômica com atomização eletrotérmica: Princípios básicos. Modificação química: convencional e permanente. Mecanismos de atomização. Atomizadores. Aplicações. Espectrometria atômica baseada em fonte de plasma: Princípios básicos. Dinâmica das reações em plasma e aspectos energéticos no plasma. Sistemas nebulizadores e processos de nebulização. Interferências. Analisadores de massas atômicas (quadropolo, duplo setor, tempo de voo). Celas de reação/colisão. Análises isotópicas por ICP-MS. Técnicas hifenizadas. Aplicações. Recentes avanços em espectrometria atômica.</p>	<p>Créditos: 06</p> <p>VAGAS: mínimo: 03 máximo: 30</p>
<p>QP822 Turma "O"</p> <p>Segunda e Quarta 14h às 16h</p> <p>Sala: IQ-14</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Orgânica VIII "Estereoquímica"</p> <p>Prof. Dr. Antonio Claudio Herrera Braga</p> <p>Ementa: O fenômeno da quiralidade, polarimetria e rotação ótica, estrutura, conformação, configuração, estereoisômeros, separação de estereoisômeros, resolução, racemização, faces e ligantes heterotópicos, quiralidade em moléculas sem centros quirais, métodos analíticos para determinação de pureza enantiomérica. Estratégias para a formação de compostos quirais.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 20</p>

<p>QP832 Turma "O"</p> <p>Quarta e Sexta 08h às 10h</p> <p>Sala: IQ-14</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química VIII "Introdução à Ciência de Polímeros"</p> <p>Prof(a)s. Dr(a)s. Maria Isabel Felisberti, Fernando Galembeck e Maria do Carmo Gonçalves</p> <p>Ementa: 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 Vétrea. 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>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS: mínimo: 03 máximo: 20</p>
---	--	---

<p>QP839 Turma "O"</p> <p>Terça e Sexta 14h às 16h</p> <p>Sala: IQ-15</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química VII "Termodinâmica dos Processos Irreversíveis"</p> <p>Prof. Dr. Adalberto Bono Maurizio Sacchi Bassi</p> <p>Ementa: Leis de Conservação (cap. II): conservação de massa, de energia e equação de movimento. Lei de Entropia e Balanceamento de Entropia (cap. III): segunda lei, equação de balanceamento de entropia e fluxo de calor, produção de entropia, energia cinética da difusão. Equações fenomenológicas (cap. IV): leis lineares, propriedades de simetria da matéria e princípio de Curie, relações recíprocas de Onsager, equações diferenciais. Estados Estacionários (cap. V): equilíbrio mecânico, produção mínima de entropia, produção não mínima de entropia. Propriedades das equações fenomenológicas e relações de Onsager (cap. VI): princípio de Curie, fluxos e forças termodinâmicas, relações de Onsager para fenômenos vetoriais e tensoriais, propriedades das transformações das relações de Onsager. Discussão sobre a fundamentação estatística (cap. VII): variáveis de estado e flutuações, reversibilidade microscópica, obtenção das relações recíprocas de Onsager, matriz dos coeficientes fenomenológicos, processos gaussianos de Markoff, equações de Langevin, entropia e flutuações caóticas. O teorema da dissipação das flutuações (cap. VIII): as funções de correlação dos processos estacionários e o teorema de Wiener-Khinchin, o princípio da casualidade e as relações de Kramers-Kronig, demonstração do teorema da dissipação das flutuações, produção de entropia em sistemas sujeitos a forças externas. Discussão dos fundamentos pela teoria cinética (cap. IX): equação de Boltzmann, equações hidrodinâmicas, equação de balanceamento da entropia e teorema H de Boltzmann, a resolução da equação de Boltzmann pelo método de Enskog, a equação de balanceamento da entropia e a primeira aproximação de Enskog, relações de Onsager, movimento browniano. Observação: Esta ementa é a cópia dos tópicos dos capítulos de II a IX do livro proposto. No decorrer do curso, maior ênfase poderá ser dada a alguns tópicos, enquanto que outros poderão ser reduzidos ou até omitidos.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS: mínimo: 03 máximo: 20</p>
<p>QP934 Turma "O"</p> <p>Quarta e Sexta 10h às 12h</p> <p>Sala: IQ-15</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química X "RMN de Sólidos"</p> <p>Prof. Dr. Fred Yukio Fujiwara</p> <p>Ementa: Conceito de spins, operadores e autofunções de spin; Equação de Bloch e a criação e detecção de coerência; instrumentação; blindagem nuclear e deslocamento químico; acoplamento dipolo-dipolo; interação quadrupolar a 1ª e 2ª ordem; teoria de relaxação; efeito de troca química; técnicas básicas: rotação ao ângulo mágico, polarização cruzada, desacoplamento heteronuclear; técnicas avançadas: cramps, mqmas, outras.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS: mínimo: 03 máximo: 40</p>

<p>QP935 Turma "O"</p> <p>Quarta 14h às 18h</p> <p>Sala: IQ-15</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química XI "Cristalografia Estrutural: aplicação a pequenas moléculas e proteínas"</p> <p>Prof. Dr. Ricardo Aparicio</p> <p>Ementa: Fundamentos de Cristalografia. Elementos de simetria e grupos de espaço. Espaço recíproco e fator de estrutura. Tensor de deslocamento anisotrópico. Formulação de Laue e a construção de Ewald. Lei de Bragg. Cristalografia Estrutural: difração de Raios X por monocristais de proteínas, pequenas moléculas orgânicas e inorgânicas. Métodos experimentais. Coleta e redução de dados. Determinação de estrutura absoluta e estudos de densidade eletrônica. Práticas computacionais com aplicações a pequenas moléculas e proteínas: resolução do Problema das Fases, construção e refinamento do modelo atômico. Validação e deposição de estruturas. Bancos de dados.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS: mínimo: 03 máximo: 20</p>
<p>QP936 Turma "O"</p> <p>Terça 19h às 23h</p> <p>Sala: IQ-15</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química X "Quimiometria: Teoria e Prática"</p> <p>Profa. Dra. Márcia 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: mínimo: 03 máximo: 20</p>

INÍCIO DO SEMESTRE: 28/02/2007

TÉRMINO DO SEMESTRE: 07/07/2007