

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA
PÓS-GRADUAÇÃO

DISCIPLINA OFERECIDA NAS FÉRIAS DE VERÃO
ATENÇÃO: A MATRÍCULA PARA A DISCIPLINA DE VERÃO DEVERÁ SER FEITA
NOS DIAS 15 a 17 DE DEZEMBRO

<p>QP435 Turma "X"</p> <p>Sala: F-10 (IQ-10)</p> <p>- Aulas 31 de janeiro a 04 de fevereiro</p> <p>Das 09:00 às 12:00 e Das 14:00 às 17:00</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química III "Cristalografia Estrutural III"</p> <p>Prof. Dr. Ricardo Aparício</p> <p>Ementa: 1. Fundamentos de Cristalografia com ênfase em monocristais de pequenas moléculas orgânicas e compostos inorgânicos. 2. Experimentos de cristalização, práticas de coletas de dados. 3. Bancos de estruturas 4. Prática computacional: redução de dados, determinação de estruturas, refinamento e deposição.</p> <p>Bibliografia: 1. C. Giacovazzo (editor); G Artioli, D. Viterbo, G. Ferraris, C. Giacovazzo: "Fundamentals of Crystallography" (IUCr Texts on Crystallography, 2.), Oxford University Press, 1992. ISBN: 0198509588 2. W. Clegg: "Crystal Structure Determination", Oxford University Press, 1998. ISBN: 0198505523</p>	<p>Créditos: 02</p> <p>VAGAS: mínimo: 04 máximo: 12</p>
--	---	---

DISCIPLINAS OFERECIDAS NO 1º SEMESTRE/2011

ATENÇÃO: A MATRÍCULA EM DISCIPLINAS PARA ALUNOS REGULARES SERÁ
DE 06 A 22 DE DEZEMBRO

DISCIPLINAS DE DISSERTAÇÃO E TESE – Matrícula semestral		
AA001 Turma "A"	Dissertação de Mestrado (Matrícula Automática para alunos regulares)	
AA002 Turma "A"	Tese de Doutorado (Matrícula Automática para alunos regulares)	
DISCIPLINAS PARA O PROGRAMA DE ESTÁGIO DOCENTE (PED) (Estas disciplinas não contam para a integralização curricular)		
CD001/J	Programa de Estágio Docente (Grupo A)	Créditos: 04
CD002/J	Programa de Estágio Docente (Grupo B)	Créditos: 04
CD003/J	Programa de Estágio Docente (Grupo C)	Créditos: 02
QP363 Turma "A"	<p>Projetos de Cooperação</p> <p>Ementa: Projetos de Cooperação Interinstitucional.</p> <p>ATENÇÃO: SOMENTE OS ALUNOS QUE FAZEM PARTE DO PROJETO PROCAD PODERÃO SE MATRICULAR</p>	Créditos: 02

<p>QP021 Turma "A"</p> <p>Segunda e Quarta 14h às 16h</p> <p>Sala: E-312 (IQ-17)</p>	<p>“Química Orgânica Avançada” Prof. Dr. Antonio Claudio Herrera Braga</p> <p>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.</p> <p>Bibliografia: Sugestões para uma revisão dos conceitos básicos: R. T. Morrison / R. N. Boyd Organic Chemistry N. L. Allinger e outros Química Orgânica Jerry March Advanced Organic Chemistry T. W. G. Solomons e outros Organic Chemistry A. Streitwieser e outros Introduction to Organic Chemistry J. Clayden e outros Organic Chemistry Para acompanhamento da disciplina: F. A. Carey / R. J. Sundberg: Advanced Organic Chemistry Ian Fleming: Frontier Orbitals and Organic Chemical Reactions E. L. Eliel / S. H. Wilen: Stereochemistry of Organic Compounds</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 25</p>
<p>QP124 Turma "A"</p> <p>Terça e Quinta 14h às 16h</p> <p>Sala: F-10 (IQ-10)</p>	<p>“Introdução à Química Quântica e Espectroscopia” Profs. Drs. Pedro Antonio Muniz Vasquez (Coordenador) e Rogério Custódio</p> <p>Ementa: Ondas de matérias em sistemas simples. Partículas em campos de potencial variável, transições. Estrutura de átomos. A ligação química de moléculas simples. Moléculas diatômicas.</p> <p>Bibliografia: Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry by Linus Pauling and E. Bright Wilson Jr. Quantum Chemistry by Henry Eyring, John Walter, and George Kimball Physical Chemistry: A Molecular Approach by Donald A. McQuarrie and John D. Simon Molecular Spectra and Molecular Structure - Vol I by Gerhard Herzberg Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy by Daniel C. Harris and Michael D. Bertolucci Molecular Vibrations: The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra by Edgar Bright Wilson, J.C. Decius, and Paul C. Cross</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 02 máximo: 30</p>
<p>QP125 Turma "A"</p> <p>Segunda e Sexta 14h às 16h</p> <p>Sala: IQ-13</p>	<p>"Introdução à Termodinâmica e à Cinética" Prof. Dr. Adalberto B. M. S. Bassi</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>Bibliografia: Physical Chemistry, Ira N. Levine (6a ed., MacGraw Hill, 2008). Physical Chemistry, R. S. Berry, S. A. Rice & J. Ross (2a ed., Oxford, 2000). Chemical Kinetics, K. J. Laidler (3a ed., Harper & Row, 1987). Chemical Kinetics: The Study of Reactions Rates in Solution, K. A. Connors (Wiley-VCH, 1990). Advanced Molecular Dynamics and Chemical Kinetics, G. Billing & K. Mikkelsen (Wiley-Interscience, 1997)</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 01 máximo: 10</p>

<p>QP144 Turma "A"</p> <p>Quarta e Sexta 10h às 12h</p> <p>Sala: F-10 (IQ-10)</p>	<p>"Fundamentos da Química Inorgânica Estrutural"</p> <p>Prof. Dr. Yoshitaka Gushikem (Coordenador)</p> <p>Ementa: Estrutura do átomo, Conceitos de Teoria do Grupo, Modelo de Ligação de Valência, Orbitais moleculares, Estado sólido e Energética envolvendo ligações químicas.</p> <p>Bibliografia: <ol style="list-style-type: none"> 1. J.E. Huheey, E.A. Keiter, R.L. Keiter "Inorganic Chemistry, Principles of Structure and Reactivity", Harpes Collins College Publishers, 4a Edição, 1993. 2. G. Herzberg, "Atomic spectra and atomic structure", Dover publications, 1944. 3. F.A. Cotton, "Chemical Application of Group Theory", J. Willey & Sons Inc. 4. S.F.A. Kettle, "Symmetry and Structure Readable Group Theory for Chemists", J. Willey & Sons, 2a Ed., 1995. 5. D.C. Harris, M.C. Bertolucci, "Symmetry and Spectroscopy, an Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy", Dover Publications, Inc, NY, 1989. </p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 30</p>
<p>QP216 Turma "B"</p> <p>Segunda e Quarta 08h às 10h</p> <p>Sala: E-312 (IQ-17)</p>	<p>"Técnicas Cromatográficas e Eletroforéticas"</p> <p>AVISO: Houve mudança na turma, no dia e Sala desta disciplina de Quinta-feira para Quarta-feira.</p> <p>Prof(s). Dr(s). Isabel C. S. F. Jardim (Coordenadora), Ana Valéria Colnaghi S. Cantú, Carla Beatriz G. Bottoli, Carol H. Collins.</p> <p>Ementa Fundamentos. Cromatografia planar. Cromatografia gasosa. Cromatografia líquida. Técnicas eletroforéticas.</p> <p>Bibliografia <ol style="list-style-type: none"> 1. L.R. SNYDER, J. J. KIRKLAND, Introduction to Modern Liquid Chromatography, 2a ed., John Wiley & Sons, 1979. 2. L.R. SNYDER, J. J. KIRKLAND, J. L. GLAJCH, Practical HPLC Method Development, 2a ed., John Wiley & Sons, 1997. 3. V.R. MEYER, Practical Performance Liquid Chromatography, 4a ed., John Wiley & Sons, 2004. 4. CAROL H. COLLINS, GILBERTO L. BRAGA, PIERINA S. BONATO (coordenadores), Fundamentos de Cromatografia, Editora da Unicamp, Campinas, 2006. 5. A. WESTON, P. R. BROWN, HPLC and CE Principles and Practice, Academic Press. 6. C. F. POOLE, S. K. POOLE, Chromatography Today, 2a ed., Elsevier Science, 1985. 7. D. A. SKOOG, F. J. HOLLER, T. A. NIEMAN, Principles of Instrumental Analysis, 5a ed. Saunders College Publishing. 8. F.R. de AQUINO NETO, D.S.S. NUNES, Cromatografia Princípios Básicos e Técnicas Afins, Interciência, Rio de Janeiro, RJ, 2003. </p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 20</p>
<p>QP227 Turma "A"</p> <p>Terça e Quinta 10h às 12h</p> <p>Sala: E-312 (IQ-17)</p>	<p>"Fundamentos de Química Analítica"</p> <p>Prof(a)s. Dr(a)s. Susanne Rath (Coordenadora), Marco Aurélio Zezzi Arruda, Fabio Augusto, Dosil Pereira de Jesus e Maria Izabel M. S. Bueno</p> <p>Ementa: Equilíbrio Químico. Íons em Solução. Teoria de Titulações. Seleção de Métodos Analíticos. Estatística aplicada à Química Analítica.</p> <p>Bibliografia: <ol style="list-style-type: none"> 1. Vitz E. Redox Redux: Recommendation for improving textbook and IUPAC definitions. Journal of Chemical Education, 2002, 79(3):397-400. 2. Barnum DW. Potential-pH diagrams. Journal of Chemical Education, 1982, 59(10):809-812. 3. Skoog DA, West DM, Holler FJ, Crouch SR. Fundamentos de Química </p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 16</p>

	<p>Análítica. Trad. M.Grassi; São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2006.</p> <p>4. Stumm W, Morgan JJ. Aquatic chemistry. 3rd ed.; Wiley Interscience Pub.; 1996.</p> <p>5. Butler JN. Ionic equilibrium: solubility and pH calculations. Wiley Interscience Pub.; 1998.</p> <p>6. Butler, J.N., Ionic Equilibrium: A Mathematical Approach, Addison-Wesley Publish Company, Menlo Park, 1964.</p> <p>7. Miller, J.C. e Miller, J. N., * *Statistics for Analytical Chemistry, Ellis Horwood, New York, Prentice Hall, 1993.</p> <p>8. Harris, DC, Análise Química Quantitativa. Rio de Janeiro: LTC Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2008.</p> <p>9. Wänninen EV, Ingman F. Metal buffers in chemical-analysis .1. Theoretical considerations. Pure and Applied Chemistry, 1987, 59(12): 1681-1692.</p> <p>10. Hulanicki A, Ingman F, Wänninen EV. Metal buffers in chemical-analysis .1. Practical considerations Pure and Applied Chemistry, 1991, 63(4): 639-642.</p>	
<p>QP268 Turma "A"</p> <p>Segunda e Quarta 19h às 21h</p> <p>Salas:</p> <p>Segunda: IQ-01</p> <p>Quarta: IQ-04</p>	<p>“Planejamento e Otimização de Experimentos”</p> <p>Prof. Dr. Roy Edward Bruns</p> <p>Ementa: Porque métodos univariados (convencionais) de otimização não funcionam? As vantagens de usar métodos multivariados. Como o número de ensaios pode ser minimizado com planejamentos multivariados e ainda obter resultados mais precisos do que aqueles provenientes de métodos univariados. Planejamentos fatoriais com dois níveis para aplicações no laboratório e planta piloto. Análise de dados e interpretação de resultados. Planejamentos adequados para obter superfícies de resposta. A otimização simultânea de várias propriedades de um produto. Análise de dados e interpretação de resultados. Aplicações para mistura. Planejamentos fatoriais fracionários para fazer triagem de fatores. Análise de dados e interpretação de resultados. Treinamento na utilização de programas computacionais que executam cálculos de resultados de fatoriais completos, fatoriais fracionários e planejamentos para análise de superfície de resposta. (Programas de domínio público).</p> <p>Bibliografia: B de Barros Neto, I.S. Scarminio e R.E. Bruns, Editora Unicamp, 2001.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 100</p>
<p>QP413 Turma "X"</p> <p>Quinta-feira 14h às 18h</p> <p>Sala: E-312 (IQ-17)</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Analítica – “Química Aquática”</p> <p>Prof(s). Dr(s). Wilson de Figueirero Jardim (Coordenador) e Anne Hélène Fostier.</p> <p>Ementa:</p> <p>Parte teórica: 1. Introdução: ciclo da água, composição física das águas naturais, águas subterrâneas e águas superficiais, água doce e água salgada;</p> <p>2. Acidez das águas: sistemas abertos e sistemas fechados: $\text{CO}_2/\text{HCO}_3^-/\text{CO}_3^{2-}$;</p> <p>3. Interface água-atmosfera: trocas nesta interface, modelos, exemplos de cálculos;</p> <p>4. Contaminantes orgânicos em água;</p> <p>5. Química dos metais em água: transporte, tempo de residência, complexação, adsorção e suas implicações;</p> <p>6. Química redox em água: diagrama pE-pH e suas interpretações ambientais.</p> <p>Parte prática: 1. Especificação de cobre usando eletrodo de seletivo de íon: determinação do produto de solubilidade do $\text{Cu}(\text{OH})_2$ e da constante de estabilidade condicional de complexos.</p> <p>2. Aplicação da química redox: propriedades redutivas do $\text{Fe}(0)$.</p> <p>3. Determinação de cafeína em águas naturais por HPLC.</p> <p>Bibliografia básica</p> <p>1- Aquatic Chemistry, Stumm W. & Morgan J.J. Wiley-Interscience Publication, J. Wiley & Sons, Inc. 1996.</p> <p>2- Aquatic Environmental Chemistry howard, A.G. Oxford Science</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 04 máximo: 16</p>

	<p>Publications. Oxford University Press. 1998.</p> <p>3- Artigos diversos relativos aos temas tratados.</p>	
<p>QP418 Turma "X"</p> <p>Sala IQ-13</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Analítica IX – “Técnicas de Medidas e Aplicações da Espectroscopia Terahertz”</p> <p>Prof. Dr. Celio Pasquini (Responsável) e Prof. Dr. Sillas Hadjiloucas</p> <p>CURSO MINISTRADO INTERNAMENTE NO PERÍODO DE: 27 a 29 DE OUTUBRO DE 2010. SOMENTE OS ALUNOS QUE PARTICIPARAM DO CURSO PODERÃO MATRICULAR-SE.</p> <p>Ementa:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Geração de radiação Terahertz utilizando fontes pulsadas e de onda contínua. - Aspectos gerais relacionados à propagação. - Técnicas de detecção e novos sistemas de medida terahertz. - Espectrômetros baseados em transformada de Fourier com ou sem partes móveis, sistemas e técnicas radiométricas. - Microscopia no infravermelho distante. - Avanços na detecção de biomoléculas sem o uso de marcadores. - Técnicas de medidas para eletrônica de alta velocidade. - Aplicações do bioeletromagnetismo em biologia e agricultura (com ênfase na produção de biocombustíveis). - Análise de desempenho de topologias novas interferométricas e polarimétricas quase-ópticas. - Medidas com onda contínua e técnicas de imagem baseadas em osciladores tipo “backward- wave”. - Lasers de cadeia multiplicativa ou de cascata. - Novas técnicas baseadas em heterodine bem como em sistemas de mistura de fótons baseadas na integração de lasers baseados em fibras-ópticas com antenas THz.. - Novas modalidades de medidas de transientes da ordem de femtosegundos para imagens e tomografia. - Medidas com sonda óptica bombeada por pulsos THz. - Modelagem matemática da propagação da radiação THz em guias de onda e tecidos. - Técnicas de processamento de sinais desenvolvidas ou adaptadas especificamente para extração de informação em espectroscopia THz. - Progressos recentes em sistemas que incorporam avanços em misturadores Schottky, SIS ou HEB, arranjo de indutância cinética e tecnologias baseadas em “band-gap” THz e metamateriais. - Aspectos relacionados à metrologia THz (radiometria de substituição realimentada). <p>Bibliografia</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Terahertz Spectroscopy, S.L. Dexheimer Ed., CRC Press, Boca Raton, FL, 2008. 2. J. Lesurf, Millimeter Wave Optics, Devices and Systems, Taylor & Francis, New York, 1990. 	
<p>QP434 Turma "X"</p> <p>Quarta-feira 14h às 16h</p> <p>Sala: F-10 (IQ-10)</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química II – “Nanobiotecnologia: Avanços na Medicina”</p> <p>Pré-requisitos: Conhecimentos Básicos m química orgânica, bioquímica e físico-química.</p> <p>Pré-Requisito: QP124 /QP125 ou AA200*</p> <p>*Autorização da Coordenadora de Pós-Graduação</p>	<p>Créditos: 02</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 15</p>

	<p>Prof. Dr. Nelson Eduardo Durán Caballero.</p> <p>Ementa: Introdução a Nanobiotecnologia; Conceitos de sistemas coloidais; nanopartículas poliméricas; lípidos sólidos; lipossomas; pontos quânticos, nanotubos de carbono; nanobiosensores; alvos dirigidos; aplicações em medicina.</p> <p>Bibliografia básica - Durán, N., Mattoso, L.H.C., de Moraes, P.C. (Eds). Nanotecnologia: Introdução, preparação e caracterizações de nanomateriais e exemplos de aplicação. ArtLiber Editora, São Paulo, Brazil pp.208 (2006). - Durán, N., P.D. Marcato, A Ingle, A Gade and M. Rai. Fungi-mediated synthesis of silver nanoparticles: Characterization processes and applications. In Progress in Mycology, (Mahendra Rai e George Kövics, Eds), Scientific Publishers, Jodhpur, India, Ch 16, pp.425-449, ISBN: 978-81-7233-636-3 (2010). - Rai, M., Birla, S., Gupta, I., Ingle, A., Gade, A., Abd-Elsalam, K., Marcato, P.D., Durán, N. Diversity in synthesis and bioactivity of inorganic nanoparticles: Progress and pitfalls. In Bioactive Inorganic nanoparticles (Ed. Dr. B. S. Sekhon) Singapore, Ludhiana (2010). - Marcato, P.D. and Durán, N. Biogenic silver nanoparticles: Applications in medicines and textiles and their health implications, IN: Metal Nanoparticles in Microbiology (Eds: Mahendra Rai, Nelson Durán and Gordon Southam), Springer verlag, Germany (2010).</p> <p>Publicações como exemplo: Durán, N., P.D. Marcato, L. Tasic and M. Durán. Nanobiotecnologia: importância e aplicações na urologia. <u>Urologia Virtual (UROVIRT)</u>, 12, Agosto/Setembro (2008). P.D. Marcato and N. Durán. New aspects of nanopharmaceutical delivery system. <u>J. Nanosci. Nanotechnol.</u> 8, 2216-2229 (2009). Durán, N., Marcato, P.D., Teixeira, Z., Durán, M., Costa, F.T.M. and Brocchi, M. "State of art of nanobiotecnology applications in neglected diseases. <u>Curr. Nanoscience.</u> 5, 396-408 (2009) Martins, D., Fungillo, L., Anazzati, M.C., Melo, P.S. and Durán, N. Antitumoral activity of L-ascorbic-acid-polyOD, L-(lactide-co-glycolide) nano particles containing violacein. <u>Intern. J. Nanomed.</u> 5, 77-85 (2010) Durán, N., Durán, M., Tasic, L., and Marcato, P.D. Nanocrystal technologies in Pharmaceuticals. <u>Quim. Nova</u>, 33, 151-159 (2010) Seabra, A.B., and Durán, N. Nitric oxide-releasing vehicles for biomedical applications. <u>J. Mater. Chem.</u> 20, 1624-1637 (2010). Durán, N., Marcato, P.D., De Conti, R., Alves, O. L., Costa, F.T.M., and Brocchi, M. Potential use of silver nanoparticles on pathogenic bacteria, their toxicity and possible mechanisms of action. <u>J. Braz. Chem. Soc.</u> 21, 949-959 (2010).</p>	
<p>QP446 Turma "X"</p> <p>Quinta-feira 16h às 18h</p> <p>Sala: E-307 (IQ-16)</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica IV "Fundamentos de Ressonância Magnética Nuclear do Estado Sólido: Aspectos Teóricos e Instrumentais"</p> <p>Profa. Dra. Heloíse de Oliveira Pastore (Coordenadora), Dr. Fábio Aurélio Bonk (Pesquisador – DQI-UNICAMP)</p> <p>Ementa: 1.Introdução ao fenômeno da RMN</p>	<p>Créditos: 02</p> <p>VAGAS: mínimo: 02 máximo: 30</p>

- a. Momentos magnéticos
- b. Magnetização nuclear na presença de um campo magnético.
- c. Magnetização de um conjunto de spins nucleares na presença de um campo magnético estático.
- 2. Princípios básicos da RMN
 - a. Pulsos de rádio frequência
 - b. Ângulos de nutação.
 - c. Regras da mão direita e da mão esquerda
 - d. O Sinal de RMN (FID).
 - e. Transformada de Fourier.
 - f. O espectro de RMN.
 - g. Bandas de excitação e potência dos pulsos de RF.
 - h. Pulsos seletivos.
 - i. Referencial Rotativo.
 - j. Detecção do sinal de RMN e ciclagem das fases dos pulsos de RF.
 - k. Processos de relaxação.
- 3. Medidas de tempos relaxação
 - a. Inversão e recuperação
 - b. Saturação e recuperação.
 - c. Ecos de Hahn
 - d. A técnica CPMG.
- 4. Interação de deslocamento químico
 - a. A interação de deslocamento químico.
 - b. Anisotropia de deslocamento químico.
 - c. Padrão de pó em RMN
 - 5. A técnica de Rotação em torno do Ângulo Mágico (MAS)
 - d. Os efeitos da rotação em torno do ângulo mágico.
- 6. Interação dipolar magnética
 - a. Interação dipolar Magnética heteronuclear e homo nuclear
 - b. Anisotropia devido a interação dipolar magnética.
 - c. Desacoplamento dipolar heteronuclear.
 - d. Desacoplamento dipolar homonuclear
- 7. Polarização Cruzada
 - a. Transferência de polarização (CP).
 - b. Condição de Hartmann-Hahn.
- 8. Interação escalar magnética
 - a. Descrição da interação escalar magnética
 - b. Determinação da constante de acoplamento escalar.
- 9. Interação quadrupolar elétrica
 - a. Aproximação de primeira ordem
 - b. Anisotropia devido a interação quadrupolar elétrica: efeitos de primeira ordem de aproximação.
 - c. Padrão de pó
 - d. Efeitos de segunda ordem de aproximação
 - e. Interação quadrupolar em segunda ordem elétrica e MAS.
- 10. Processamento do sinal de RMN e parâmetros de aquisição
 - a. Digitalização do sinal de RMN.
 - b. Tempo de aquisição do sinal.
 - c. Transformada discreta de Fourier.
 - d. janela espectral.
 - e. Teorema de Nyquist
 - f. Relação entre sinal e ruído

Bibliografia:

1. Multinuclear Solid State NMR of Inorganic Materials. K.J.D. Mackenzie and M.E. Smith.
2. NMR Spectroscopy, principles and applications. Melinda J. Duer.
3. Ressonância Magnética Nuclear: Fundamentos, Métodos e Aplicações. Victor M.S. Gil e Carlos F.G.C. Geraldes.

<p>QP448 Turma "A"</p> <p>Segunda e Terça 10h às 12h</p> <p>Sala: E-307 (IQ-16)</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>Bibliografia: Será fornecida pelo professor. Material de apoio do Laboratório de Química do Estado Sólido (HTTP://www.lges.iqm.unicamp.br)</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 20</p>
<p>QP822 Turma "X"</p> <p>Segunda e Quarta 16h às 18h</p> <p>Sala: E-312 (IQ-17)</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Orgânica VIII “Teoria de Orbitais Moleculares”</p> <p>Prof. Dr. Cláudio Francisco Tormena (coordenador) e Prof. Dr. Luiz Carlos Dias</p> <p>Ementa: Introdução a teoria de orbitais moleculares (MO) e a orbitais naturais de ligação (NBO). 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. Interpretação de parâmetros espectroscópicos utilizando NBO.</p> <p>Bibliografia:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Valency and Bonding: A natural bond orbital donor-acceptor perspective, Frank Weinhold and Clark Landis, Cambridge University Press, 2005. ISBN-13 978-0-521-83128-4 - Why chemical reactions happen, James Keeler, Peter Wothers, Oxford University Press, 2009. ISBN 978-0-19-924973-2 - Chemical Structure and Reactivity: An integrated approach, James Keeler, Peter Wothers, Oxford University Press, 2008. ISBN 978-0-19-928930-1 - Bond strengths: The importance of hyperconjugation Author(s): Ingold KU (Ingold, K. U.), DiLabio GA (DiLabio, Gino A.) ORGANIC LETTERS 2006, 8 (26), 5923-5925. - A theoretical study of the stereoselectivities of the Diels-Alder addition of cyclopentadiene to ethyl-(S)-lactyl acrylate catalyzed by aluminium chloride Author(s): Bakalova SM, Santos AG EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY 2006, (7), 1779-1789. - On the origin of cis/trans stereoselectivity in intramolecular Diels-Alder reactions of substituted pentadienyl acrylates: A comprehensive density functional study Author(s): Paddon-Row MN, Moran D, Jones GA, Sherburn MS JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY 2005, 70 (26): 10841-10853. - Synthesis and thermal ring opening of trans-3,4-disilylcyclobutene Author(s): Murakami M, Hasegawa M ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION 2004, 43 (37): 4874-4876. - Manifestation of stereoelectronic effects on the calculated carbon-hydrogen bond lengths and one-bond (1)J(C-H) NMR coupling constants. Relative acceptor ability of the carbonyl (C=O), thiocarbonyl (C=S), and methylenide (C=CH₂) groups toward C-H donor bonds Author(s): Martinez-Mayorga K, Juaristi E, Cuevas G JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY 2004, 69 (21): 7266-7276 	<p>Crédito: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 03 máximo: 20</p>

<p>QP934 Turma "X"</p> <p>Terça e Quinta 19h às 21h</p> <p>Sala: E-312 (IQ-17)</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química X “Quimiometria: Análise Multivariada de Dados”</p> <p>Profa. Dra. Márcia Miguel Castro Ferreira</p> <p>ATENÇÃO: ESSA DISCIPLINA TERÁ INÍCIO NO DIA 01/03/2011.</p> <p>Ementa</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Análise Mulvariada: <ul style="list-style-type: none"> - Introdução - Preparação dos dados para análise 2. Análise Exploratória dos dados: <ul style="list-style-type: none"> - PCA Análise de Componentes Principais - HCA Análise Hierárquica de Agrupamentos 3. Construção de modelos de Calibração: <ul style="list-style-type: none"> - PCR Regressão por componentes principais - PLS Regressão por mínimos quadrados parciais 4. Construção de modelos de Classificação (Reconhecimento de Padrões): <ul style="list-style-type: none"> - KNN - SIMCA 5. Aplicações de acordo com o interesse dos alunos. <p>Bibliografia</p> <p>CHEMOMETRICS A Practical Guide K. Beebe, R. Pell. M. B. Seasholtz, John Wiley & Sons (1998).</p> <p>Applied Chemometrics for Scientists Richard G. Brereton, John Wiley & Sons (2007).</p> <p>HANDBOOK OF CHEMOMETRICS AND QUALIMETRICS; Data Handling In Science and Technology, Volumes 20A e B Massart, D. L.; Vandeginste, B. G. M.; Buydens, L. M. C.; De Jong, S.; Lewi P. J.; Smeyers-Verbeke. J.; Elsevier, Amsterdam, 1997.</p>	<p>Crédito: 04</p> <p>VAGAS: Mínimo: 03 Máximo: 20</p>
---	---	--

INÍCIO DO SEMESTRE: 22 de fevereiro de 2011
TÉRMINO DO SEMESTRE: 08 de julho de 2011