

DISCIPLINAS OFERECIDAS - 2o. SEMESTRE DE 1997

<p>QP021 Turma "A"</p>	<p>Química Orgânica Avançada</p> <p>Prof. Dr. Antonio Claudio H.Braga</p> <p>Ementa: Ligação Química. Ligações localizadas e deslocalizadas. Estereoquímica. Relações entre estrutura e reatividade. Tipos fundamentais de reações orgânicas.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS: Mínimo: 04 Máximo: 25</p>
<p>QP031 Turma "A"</p>	<p>Química Quântica I</p> <p>Prof. Dr. Rogério Custodio</p> <p>Ementa: Mecânica ondulatória. Operadores e relações de incerteza. Momento angular. Potenciais esfericamente simétricos. Átomo multieletrônico. Álgebra matricial. Métodos de aproximação. Spin. Estrutura Atômica.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS Mínimo: 03 Máximo: 50</p>
<p>QP142 Turma "A"</p>	<p>Química de Compostos Organometálicos de Metais de Transição</p> <p>Profa.Dra.Maria D.Vargas</p> <p>Ementa: Complexos carbonílicos, ciclopentadienílicos, olefínicos, alquílicos, acílicos e hidretos de metais de transição. Reações de inserção, eliminação, redutiva e ataques eletrofílicos e nucleofílico de complexos organometálicos.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS Mínimo: 03 Máximo: 20</p>
<p>QP231 Turma "A"</p>	<p>Cinética Química</p> <p>Profa. Dra. Inés Joeques</p> <p>Ementa: Introdução. Teorias de colisão, complexo ativado, reações unimoleculares e dinâmica molecular. Reações em solução. Métodos cinéticos para o estudo de reações rápidas.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS Mínimo: 03 Máximo: 50</p>
<p>QP234 Turma "A"</p>	<p>Físico Química Coloidal e de Superfícies</p> <p>Prof. Dr. Fernando Galembeck</p> <p>Ementa: Tensão superficial e interfacial. Capilaridade. Interfaces líquidas. Filmes superficiais. Dupla camada elétrica. Superfícies de sólidos. Forças de curto e longo alcance. Ângulos de contato. Detergência. Nucleação e cristalização. Adsorção. Emulsões e espumas. Quimissorção e catálise.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS Mínimo: 03 Máximo: 50</p>

<p>QP266 Turma "A"</p>	<p>Planejamento Experimental e Análise de Dados Químicos</p> <p>Prof. Dr. Roy E.Bruns</p> <p>Ementa: Métodos de Simplex básico e Simplex modificado. Planejamento fatorial e análise de superfícies de resposta na otimização de sistemas e processos químicos com aplicação integrada destes métodos. Métodos de componentes principais e fatores principais na análise de dados químicos. Análise de agrupamento e método de reconhecimento de padrões em classificações baseadas em medidas químicas. Calibração Multivariada em química analítica usando os métodos de componentes principais e de mínimos quadrados parciais(PLS). Pacotes quimiométricos para microcomputadores.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS Mínimo: 03 Máximo: 50</p>
<p>QP313 Turma "A"</p>	<p>Métodos Espectroquímicos de Análise</p> <p>Profs.Drs.: João Carlos de Andrade(Coordenador) Marco Aurélio Z.Arruda Maria Izabel M.S.Bueno</p> <p>Ementa: Métodos baseados na absorção, emissão e espalhamento da radiação eletromagnética.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS: Mínimo: 03 Máximo: 20</p>
<p>QP314 Turma "A"</p>	<p>Métodos Analíticos Aplicados à Determinação de Traços</p> <p>Profs.Drs.: Nivaldo Baccan(Coordenador) Solange Cadore 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: Mínimo: 03 Máximo: 30</p>
<p>QP413 Turma "S"</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Analítica I (Calibração Multivariada em Química Analítica)</p> <p>Prof. Dr. Ronei Jesus Poppi</p> <p>Ementa: Calibração univariada, calibração multivariada por mínimos quadrados clássico (CLS) e inverso (ILS), análise de componentes principais (PCA), regressão de componentes principais (PCR), mínimos quadrados parciais (PLS), calibração multivariada não linear, redes neurais, calibração multivariada em dados de ordem superior, seleção de variáveis em calibração multivariada, algoritmos genéticos. Utilização de programas em linguagem MATLAB, relacionados aos tópicos do curso, para tratamento de dados químicos reais.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS Mínimo: 05 Máximo: 40</p>

	<p>Bibliografia:</p> <ul style="list-style-type: none"> - H.Martens e T.Naes, "Multivariate Calibration", Wiley, New York, 1991. - D.L.Massart, B.G.M.Vandeginste, S.N.Deming, Y.Michotte, L.Kaufman, "Chemometrics: a textbook", Elsevier, amsterdam, 1988. - J.Zupan e J.Gasteigner, "Neural Networks for Chemists", VCH, Weinheim, 1993 	
QP422 Turma "A"	<p>Introdução à Espectrometria de Massas</p> <p>Prof. Dr. Marcos Nogueira Eberlin</p> <p>Ementa: Interpretação de espectros de massas. Mecanismos de fragmentação. Métodos alternativos de ionização. íons metaestáveis.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS Mínimo: 04 Máximo: 20</p>
QP423 Turma "S"	<p>Tópicos Especiais em Química Orgânica I (Biotransformações em Química Orgânica)</p> <p>Prof. Dr. Nelson Eduardo D. Caballero</p> <p>Ementa: a) Introdução a enzimas e microorganismos. b) Uso de enzimas em síntese orgânica. c) Uso de fungos, bactérias e leveduras em síntese orgânica. d) Uso industrial das enzimas e microorganismos em biotransformações de moléculas de interesse farmacológico. REFERÊNCIAS: Publicações da literatura 1996 e 1997.</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS: Mínimo: 04 Máximo: 20</p>
QP446 Turma "S"	<p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica IV (Interações hospedeiro-convidado)</p> <p>Prof. Dr. Oswaldo L. Alves</p> <p>Ementa: Conceitos gerais; nomenclatura dos compostos de inclusão; compostos de inclusão: dianin, hidroquinona, uréia e tiouréia, aplicações; clatratos tipo Hoffman: preparação, caracterização e propriedades; compostos de inclusão envolvendo macrocíclicos: criptatos, éteres-coroa, etc.; compostos de intercalação: preparação e propriedades; perspectivas de utilização de compostos de inclusão como materiais ou precursores de materiais com importância tecnológica. Bibliografia: Será fornecida pelo professor. O curso será fortemente apoiado em trabalhos publicados em revistas.</p>	<p>Créditos: 06</p> <p>VAGAS: Mínimo: 03 Máximo: 20</p>

<p>QP464 Turma "S"</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Interdisciplinar II</p> <p>Prof. Dr. Marco-Aurélio De Paoli</p> <p>Ementa: 1) Introdução Geral. 2) Tipos de reações de degradação. a) Degradação com cisão de cadeias e reticulação; b) Degradação sem cisão de cadeias; c) Auto-oxidação; d) Depolimerização. 3) Métodos usados para acompanhar os processos de degradação. 4) Iniciação do processo de degradação. a) Iniciação térmica; b) Iniciação fotoquímica; c) Iniciação por esforço mecânico; d) Radiação de alta energia energia; e) Iniciação química. 5) Estabilizantes e mecanismos de estabilização. a) Estabilizantes térmicos, anti-oxidantes; b) Foto-estabilizantes; c) Estabilizantes para radiação de alta energia. 6) Biodegradação e polímeros biodegradáveis. a) Biodegradação de polímeros naturais; b) Biodegradação de polímeros sintéticos; c) Síntese de polímeros Bio-degradáveis. 7) Estratégias alternativas, pirólise, reciclagem e meio ambiente. a) Pirólise e reciclagem.</p> <p>Bibliografia</p> <ol style="list-style-type: none"> 1- "Polymer Degradation: Principles and Practical Applications", W. Schnabel, Hanser International, Munique (1981). 2- "Degradation and Stabilization of Polyolefins", N.S. Allen, Applied Science Publishers, Londres (1983). 3- "Degradation and Stabilization of PVC", editado por E.D. Owen, Elsevier Applied Science Publishers, Londres (1984). 4- "Polymer Degradation and Stabilization", N. Grassie e G. Scott, Cambridge University Press, Cambridge (1985). 5- "Plastics Additives Handbook", editado por R.Gächter e H. Müller, Hanser Publishers, Munique (1983). 6- "Grosse Moleküle", H.-G. Elias, Springer Verlag, Berlin (1985). 7- "Polymer Degradation", T. Kelen, Van Nostrand Reinhold Comp., New York (1983). 8- "Plastics Recycling, products and processes", R.J. Ehrig editor, Hanser Verlag, Munique, (1992). 9- "Stoffliches Kunststoff-Recycling, Anlagen, Komponenten, Hersteller", W. Michaeli, M. Bittner e L. Wolters, Hanser Verlag, Munique (1993). <p>Obs- Não será aceita a matrícula ou inscrição de pessoas que não sejam alunos regulares do curso de pós-graduação do IQ ou da FEQ.</p>	<p>Créditos: 06</p> <p>VAGAS: Mínimo: 05 Máximo: 30</p>
--------------------------------	---	---

<p>QP521 Turma "A"</p>	<p>Introdução à RMN de Carbono-13</p> <p>Profa.Dra. Anita J.Marsaioli</p> <p>Pré-requisito: QP222/AA200</p> <p>Ementa: O experimento de RMN através de pulsos com transformada de Fourier: princípios e técnicas. Aplicações: RMN e carbono-13, deutério, oxigênio-17 e alumínio-27. Introdução à RMN bidimensional. Nocões de RMN de sólidos e obtenção de imagens(tomografia).</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS: Mínimo: 04 Máximo: 20</p>
<p>QP648 Turma "S"</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica VI</p> <p>Prof.Dr. Celso U.Davanzo</p> <p>Ementa: O efeito Raman; uso do interferômetro de Michelson e da transformada de Fourier na obtenção do espectro Raman; vantagens em relação aos espectrômetros dispersivos; a excitação no infravermelho próximo: as peculiaridades e novas perspectivas; aplicações.Bibliografia: A ser fornecida pelo professor.</p>	<p>Créditos: 06</p> <p>VAGAS: Mínimo: 03 Máximo: 25</p>
<p>QP649 Turma "S"</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica IX</p> <p>Profa.Dra. Maria D.Vargas(Coordenadora) Prof. Dario Braga e Fabrizia Grepioni(Universidade de Bologna-Itália)</p> <p>Ementa: 1st Part - Basics of Crystallography - (in a very practical problem-solving-oriented way).a) unit cell and asymmetric unit; symmetry, space groups, diffraction; how to choose a space group?; how to check correctness? b) one single molecule in the asymm. unit; two or more molecules in the asymm. unit; less than a molecule in the asymm. unit examples.c) how to solve a structure (some idea of direct methods); reading a fourier map, tricks and traps; how to refine a structure; rigid body, constraints, R-factors.d) how to judge the quality of a refinement; how to detect errors.2nd Part - Representation and use of the dataa) Graphic softwares, space filling, thermal motion, ball-and stick model.b) A static view of the structure; a dynamic view of the structure.c) Bond parameters, how good is a number on a bond, how good is an angle? how far can we go with comparisons?3rd Part - The crystal - the crystal packing and intermolecular interactions.4th Part - Dynamicsa) Dynamics in solution versus dynamics in the solid state: motion about equilibrium and far from equilibrium; phase transitions and crystal to crystal transformations; units cell variation with temperature; solid state reactivity.b) Time scale problemc) Spectroscopic techniques - solid state NMR: examples</p>	<p>Créditos: 03</p> <p>VAGAS: Mínimo: 03 Máximo: 25</p>

	<p>from organicsd) Thermal motion analysis: rigid body treatment, internally moving groups; examplee) Atom-atom potential energy calculations: use of AAPEC to estimate reorientational barriers; intermolecular interactions; examples from organics.f) Motion in solid organometallic complexes by classes of compounds.5th Part - Crystal engineeringa) crystal engineering (intermolecular interactions, hydrogen bondings, salts,etc.)b) crystal properties (packing energies, packing coefficients, motion, diffusion, etc.)c) crystal structure generation theory and practice.</p> <p>Reference literature:1) Books:a) Ebsworth, Rankin, Cradock - Structural methods in Inorganic Chemistryb) Glusker and Trueblood - Crystallography - a Primerc) Fyfe - Solid state NMR for chemistsd) Cheetham and Day - Solid state chemistry techniquese) Desiraju Crystal Engineering - The design of organic solidsf) Buergi and Dunitz - Structure correlationg) Desiraju - The crystal as a supramolecular entity; John Wiley 1996.2) Papersa) Braga, D. - Chem. Rev. 1992, 92,623b) Braga, D.; Grepioni, F. - J. Chem. Soc. Chem. Commun. 1996, 571c) Gavezzotti, A.; Simonetta, M. - Chem. Rev. 1981, 82.d) Gavezzotti, A. - Acc. Chem. Res. 1994, 27, 309.e) Dunitz, J.D.; Schomaker, V.; Trueblood, K.N. - J. Phys. Chem. 1988, 82, 856.f) Dunitz, J.D., Maverick, E.F.; Trublood, K.N. - Angew Chem. Int. Ed. Engl. 1988, 27, 880.g) Dunitz, J.; Bernstein, J. - Acc. Chem. Res. 1995, 28, 193.</p>	
QP663 Turma "S"	<p>Tópicos Especiais em Química Interdisciplinar I</p> <p>Profa.Dra. Márcia Miguel Castro Ferreira</p> <p>Ementa: 1. Análise exploratória de dados - Análise de Componentes Principais (PCA), Análise Hierárquica de Dados (HCA); 2. Construção de Modelos de Regressão (Calibração Multivariada), Regressão por componentes principais (PCA), Regressão por mínimos quadrados parciais (PLS); 3. Construção de modelos de Classificação (Reconhecimento de Padrões) pelo Método do Késimo vizinho mais próximo (KNN), e pelo método "Soft Independent Modeling of Class Analogy (SIMCA); 4. Deconvolução de Espectros (Multicomponent Curve Resolution), Resolução de curvas em espectrofotometria e cromatografia, Modelagem de cinética química; 5. Análise de dados gerados por Instrumentos Hifenados (GC-MS, luminescência total, etc.).</p>	<p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS: Mínimo: 03 Máximo: 50</p>
QP841 Turma "S"	<p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica XI</p> <p>Prof.Dr. Gilson Herbert M.Dias</p> <p>Ementa: Complexos de metais de transição como agentes</p>	<p>Créditos: 03</p> <p>VAGAS: mínimo:</p>

	quimioterapêuticos; efeito e influência trans; ativação e transformação orgânica de moléculas coordenadas; métodos sintéticos - novas metodologias e estratégias sintéticas; questões teóricas; química dos fulerenos C60 e C70. Bibliografia a ser fornecida pelo professor.	03 máximo: 10
QP842 Turma "S"	Tópicos Especiais em Química Inorgânica VIII Prof. Dr. Ulf f. Schuchardt Ementa: Catálise ácida, catálise básica, catálise de reações redox, catálise por complexos ocluídos, catálise por zeólitas bifuncionais, perspectivas.	Créditos: 03 VAGAS: mínimo: 03 máximo: 30
QP849 Turma "S"	Tópicos Especiais em Química Inorgânica VII Prof. Dr. Marco-Aurélio De Paoli (Coordenador) Prof. Galo Cárdenas Ementa: 1) Introduction: a) Temperatures, energies and chemistry; b) Chemistry headings. 2) New laboratory techniques and methods: a) Introduction; b) Optical molasses apparatus; c) Pulsed cluster beam (PCB); d) Continuous flow cluster beam (CFCB); e) Ionized cluster beam (ICB); f) Gas evaporation method (GEM); g) Laser plume method (LPM); h) Preparative-scale matrix isolation apparatus for small molecules; i) Solvated metal atom dispersion (SMAD) apparatus. 3) Alkali and alkaline earth elements (groups 1 and 2): a) Free atoms; b) Free clusters; c) Bimetallic and other binuclear clusters/particles. 4) Early transition-metal elements (Groups 3-7): a) Early transition-metal atoms; b) Early transition-metal clusters; c) Bimetallic and binuclear systems. 5) Late transition metals (groups 8-10): a) Late transition-metal atoms; b) Late transition-metal clusters; c) Bimetallic and binuclear systems. 6) Copper and zinc group elements (Groups 11-12): a) Copper and zinc group metal atoms; b) Copper and zinc group metal clusters; c) Bimetallic and binuclear systems; d) Particles and films. 7) Boron group (group 13): a) Boron group atoms; b) Boron group clusters; c) Bimetallic and binuclear/trinuclear systems; d) Thin films. 8) Carbon group (Group 14): a) Carbon group atoms and vapors; b) Carbon group clusters including fullerenes C60; c) Binuclear systems; d) Films of Si, Ge, Sn and their oxides prepared by vaporization. 9) Phosphorus and sulfur groups (Groups 15-16): a) Phosphorus and sulfur group vapors; b) Binuclear and polynuclear species; c) Thin films. 10) Lanthanide and Actinide: a) Lanthanide and actinide atoms; b) Lanthanide and actinide clusters. Bibliografia: A ser fornecida pelo professor.	Créditos: 03 VAGAS: mínimo: 03 máximo: 30