

## Disciplinas oferecidas 2º semestre de 1998

|                               |  |   |
|-------------------------------|--|---|
| <p>QP021</p> <p>Turma "A"</p> | <p>Química Orgânica Avançada</p> <p>Prof. Dr. José Augusto Rosário Rodrigues</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:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 25</p> |
| <p>QP031</p> <p>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. Método SCF de Hartree-Fock.</p>  | <p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p> |
| <p>QP215</p> <p>Turma "A"</p> | <p>Métodos Cromatográficos de Separação</p> <p>Profs. Drs. Fabio Augusto e Antonio Luiz Pires Valente</p> <p>Ementa: Cromatografia planar, cromatografia gasosa, cromatografia líquida clássica e cromatografia líquida de alta eficiência.</p> <p><b>ATENÇÃO:</b> Antes de se matricularem nesta disciplina, falar com os Profs. Fabio Augusto ou Antonio Luiz Pires Valente.</p>   | <p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 05</p> |
| <p>QP244</p> <p>Turma "A"</p> | <p>Métodos Eletroquímicos Avançados</p> <p>Profs. Drs. Marco-Aurélio De Paoli e Carla M. P. da Fonseca</p> <p>Ementa: Voltametria. Cronoamperometria. Cronopotenciometria. Cronocalorimetria. Efeito viragem. "Stress" eletroquímico e espectroscopia de impedância. Métodos espectroscópicos associados. Bibliografia: A.M. Brett, "Electroquímica, princípios, métodos e aplicações. A.J. Bard e L.R. Faulkner, "Electrochemical methods, fundamentals and applications". Avaliação: Monografia sobre a aplicação de um dos métodos a um problema específico do aluno.</p> | <p>Créditos: 06</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p> |

|                               |   |  |
|-------------------------------|---|--|
| <p>QP262</p> <p>Turma "A"</p> | <p>Introdução à História da Química</p> <p>Prof. Dr. Aécio Pereira Chagas</p> <p>Ementa: Apresentação e discussão das principais fases do desenvolvimento da química. Pré-Alquimia. Alquimia. Renascimento. Revolução industrial nos séculos XIX e XX e suas relações com a sociedade e com a economia visando, principalmente, a evolução da química no Brasil.</p>  | <p>Créditos: 06</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p>  |
| <p>QP266</p> <p>Turma "A"</p> | <p>Planejamento Experimental e Análise de Dados Químicos</p> <p>Prof. Dr. Roy Edward Bruns</p> <p>Ementa: Métodos de simplex básico e simplex modificado. Planejamento fatorial e análises 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:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 100</p> |
| <p>QP317</p> <p>Turma "A"</p> | <p>Instrumetação e Automação em Química Analítica</p> <p>Profs. Drs. Jarbas José Rodrigues Rohwedder, Célio Pasquini e Marco Aurélio Zezzi Arruda</p> <p>Ementa: 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>QP322</p> <p>Turma "A"</p> | <p>Sínteses Orgânicas</p> <p>Pré-Req.: QP021/AA200</p> <p>Prof. Dr. Carlos Roque Duarte Correia</p> <p>Ementa: Formações de ligações carbono-carbono, carbono-nitrogênio e carbono-halogênio. Oxidação e redução. Sínteses homo e heteroaromática. Rearranjos. Sínteses diversas.</p>   | <p>Crédito: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p>   |

|                               |  |   |
|-------------------------------|--|---|
| <p>QP332</p> <p>Turma "A"</p> | <p>Termodinâmica Química I</p> <p>Aspectos Modernos da Química do Estado Sólido</p> <p>Profa. Dra. Inés Joeques</p> <p>Ementa: Fundamentos de termodinâmica clássica: leis, equações, métodos, fases puras e seus equilíbrios. Misturas e soluções. Reações químicas. Aplicações a diversos sistemas de interesse químico.</p>   | <p>Crédito: 12</p> <p>VAGAS</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 30</p>   |
| <p>QP414</p> <p>Turma "U"</p> | <p>Tópicos Especiais em Química Analítica II</p> <p>Métodos Qualitativos e Quantitativos em Cromatografia</p> <p>Profs. Drs. Fabio Augusto e Antonio Luiz Pires Valente</p> <p>Ementa: Fundamentação teórica de cromatografia. Instrumentação básica. Métodos de preparo de amostras. Construção e validação de curvas analíticas em cromatografia</p>   | <p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 10</p> |
| <p>QP423</p> <p>Turma "T"</p> | <p>Tópicos Especiais em Química Orgânica I</p> <p>"Aplicação de Reagentes Organometálicos em Síntese Orgânica" - Pré-Req.:QP-021</p> <p>Prof. Dr. Ronaldo Aloise Pilli</p> <p>Ementa: Formalismos e mecanismos de reações envolvendo reagentes organometálicos. Aplicações sintéticas de hidretos de metais de transição, complexos s carbono-metal, complexos metal de transição-carbeno, complexos olefínicos e acetilênicos de metais de transição, complexos de metal de transição h<sup>3</sup>-alílicos e complexos de compostos aromáticos com metal de transição. Exemplos de emprego de reagentes organometálicos na síntese de produtos naturais. Bibliografia: Organometallic reagents in synthesis, P.R. Jenkins; Transition metals in the synthesis of complex organic molecules, L.S. Hegedus; Orgnometallic in synthesis. A manual, M. Schlosser.</p> | <p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p> |
| <p>QP436</p> <p>Turma "U"</p> | <p>Tópicos Especiais em Físico-Química IV</p> <p>"Métodos Térmicos Aplicados a Sistemas de Natureza Biológica"</p> <p>Prof. Dr. Pedro Luiz Onófrío Volpe</p> <p>Ementa: Calorimetria: passado, presente, futuro. Sensores térmicos: do termômetro a termopilha. Tipos de calorímetros e microcalorímetros: Adiabático, isoperibólico, isotérmico e de condução de calor. Técnicas calorimétricas: quebra de ampoula, titulação, fluxo contínuo e fluxo</p>   | <p>Créditos: 03</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 30</p> |

|                               |   |   |
|-------------------------------|---|---|
|                               | <p>com mistura. Microcalorimetria: monitoramento de processos de crescimento e morte de microorganismos – exigências energéticas em sistemas biológicos. Microcalorimetria no estudo de processos aeróbicos e anaeróbicos, respiração e fermentação. Cinética de transferência de drogas da solução aquosa para a célula de microorganismo. Microcalorimetria no estudo da atividade biológica de drogas na respiração de microorganismos. Resposta X produção de calor. O desacoplamento da cadeia respiratória. Monitoramento em tempo real da produção de calor em animais pequenos (<math>\text{mWg}^{-1}</math>). DSC convencional. Micro-DSC, análise da estabilidade termodinâmica de biomoléculas.</p>  |   |
| <p>QP443</p> <p>Turma "U"</p> | <p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica I</p> <p>"Energética em Química Inorgânica"</p> <p>Prof. Dr. Claudio Airoidi</p> <p>Ementa: 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. Bibliografia: Energetics of organometallic species, J.A. Martinho Simões; Coord. Chem. Ver., C. Airoidi and Sa.P. Chagas; Chem. Ver., J.A. Martinho Simões and J.L. Beauchamp; Molecular structure and energetics, W.E. Dasent.</p> | <p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p> |
| <p>QP446</p> <p>Turma "U"</p> | <p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica IV</p> <p>"Química de Materiais Amorfos"</p> <p>Prof. Dr. Oswaldo Luiz Alves</p> <p>Ementa: 1.Materiais não-cristalinos; 2.Desordem estrutural; 3.Métodos de preparação de materiais amorfos; 4.Transição de fases; 5.Transição vítrea; 6.Aplicações.</p>  | <p>Créditos: 06</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p> |
| <p>QP464</p> <p>Turma "U"</p> | <p>Tópicos Especiais em Química Interdisciplinar II</p> <p>"Processamento de polímeros"</p> <p>Profs. Drs. Marco-Aurelio De Paoli e Giacomo Ruggeri (Universitá de Pisa)</p> <p>Ementa: Introdução geral a polímeros, propriedades e processamento. Relações entre estrutura macromolecular e parâmetros de</p>   | <p>Créditos: 06</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p> |

|                               |   |   |
|-------------------------------|---|---|
|                               | <p>processamento. Propriedades reológicas. Processamento por extrusão, mono e dupla-rosac. Injeção e injeção e sopro. Termoformagem. Processamento reatico, extrusão e mistura. Bibliografia: Textbook of polymer science, F.W. Billmeyer Jr., Industrial plastics: theory and application, 2<sup>nd</sup>; Coincise Encyclopedia of Polymer Processing &amp; Applications, P.J. Corish.</p>  |   |
| <p>QP649</p> <p>Turma "U"</p> | <p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica IX<br/>"Catálise Ziegler-Natta"</p> <p>Prof. Dr. Ulf Friedrich Schuchardt</p> <p>Ementa: Catalisadores de Ziegler-Natta de primeira a Quinta geração. Heterogeneização de catalisadores de Ziegler-Natta. Processos de polimerização de Ziegler-Natta. Caracterização de polímeros de Ziegler-Natta. Utilização dos polímeros de Ziegler-Natta.</p>  | <p>Créditos: 03</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p> |
| <p>QP663</p> <p>Turma "U"</p> | <p>Tópicos Especiais em Química Interdisciplinar I</p> <p>"Aplicações de Espectroscopia no Infravermelho com Transformada de Fourier"</p> <p>Prof. Dr. Celso Ulysses Davanzo</p> <p>Ementa: Origem do espectro infravermelho e sua interpretação através de coordenadas normais. Obtenção do espectro por transformada de Fourier de interferogramas: implicações na resolução, reprodutibilidade, formato, etc. Técnicas de obtenção de espectros no infravermelho para os diferentes estados da matéria: transmissão, reflectância total atenuada, reflectância especular, reflectância difusa. Espectroscopia raman por transformada de fourier. Análise quantitativa. Bibliografia: Chemical infrared fourier transform spectroscopy, P.R. Griffiths, Fourier transform raman spectroscopy, D.B. Chase e J. F. Rabolt; Infrared and raman spectroscopy of inorganic and coordination compounds, Partes A e B, K. Nakamoto; Fundamentos da espectroscopia raman e no infravermelho, O. Sala; The Infrared spectra of complex molecules, Vols. 1 e 2, L.J. Bellamy; Advances in applied Fourier transform infrared spectroscopy, M.W. Mackenzie; Practical fourier transform infrared spectroscopy, J.R. Ferraro e K. Krishnan.</p> | <p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p> |
| <p>QP822</p> <p>Turma "U"</p> | <p>Tópicos Especiais em Química Orgânica VIII</p> <p>"Teoria de Orbitais Moleculares"</p> <p>Prof. Dr. Luiz Carlos Dias</p> <p>Ementa: Orbitais de fronteira em reações iônicas. Térmicas pericíclicas, radicares e fotoquímica.</p>  | <p>Crédito: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p>  |

|                               |   |   |
|-------------------------------|---|---|
| <p>QP649</p> <p>Turma "U"</p> | <p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica IX<br/>"Catálise Ziegler-Natta"</p> <p>Prof. Dr. Ulf Friedrich Schuchardt</p> <p>Ementa: Catalisadores de Ziegler-Natta de primeira a Quinta geração. Heterogeneização de catalisadores de Ziegler-Natta. Processos de polimerização de Ziegler-Natta. Caracterização de polímeros de Ziegler-Natta. Utilização dos polímeros de Ziegler-Natta.</p>  | <p>Créditos: 03</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p> |
| <p>QP663</p> <p>Turma "U"</p> | <p>Tópicos Especiais em Química Interdisciplinar I</p> <p>"Aplicações de Espectroscopia no Infravermelho com Transformada de Fourier"</p> <p>Prof. Dr. Celso Ulysses Davanzo</p> <p>Ementa: Origem do espectro infravermelho e sua interpretação através de coordenadas normais. Obtenção do espectro por transformada de Fourier de interferogramas: implicações na resolução, reprodutibilidade, formato, etc. Técnicas de obtenção de espectros no infravermelho para os diferentes estados da matéria: transmissão, reflectância total atenuada, reflectância especular, reflectância difusa. Espectroscopia raman por transformada de fourier. Análise quantitativa. Bibliografia: Chemical infrared fourier transform spectroscopy, P.R. Griffiths, Fourier transform raman spectroscopy, D.B. Chase e J. F. Rabolt; Infrared and raman spectroscopy of inorganic and coordination compounds, Partes A e B, K. Nakamoto; Fundamentos da espectroscopia raman e no infravermelho, O. Sala; The Infrared spectra of complex molecules, Vols. 1 e 2, L.J. Bellamy; Advances in applied Fourier transform infrared spectroscopy, M.W. Mackenzie; Practical fourier transform infrared spectroscopy, J.R. Ferraro e K. Krishnan.</p> | <p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p> |
| <p>QP822</p> <p>Turma "U"</p> | <p>Tópicos Especiais em Química Orgânica VIII</p> <p>"Teoria de Orbitais Moleculares"</p> <p>Prof. Dr. Luiz Carlos Dias</p> <p>Ementa: Orbitais de fronteira em reações iônicas. Térmicas pericíclicas, radicares e fotoquímica.</p>  | <p>Crédito: 12</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 03</p> <p>máximo: 20</p>  |
| <p>QP934</p> <p>Turma "U"</p> | <p>Tópicos Especiais em Físico –Química X</p> <p>"Análise Multivariada de Dados Experimentais de Química"</p>   | <p>Créditos: 12</p> <p>VAGAS</p>                                      |

|  |  |                                    |
|--|--|------------------------------------|
|  | <p>Profa. Dra. Marcia 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>mínimo: 03</p> <p>máximo:20</p> |
|--|--|------------------------------------|