

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA
PÓS-GRADUAÇÃO
DISCIPLINAS OFERECIDAS NO 2º SEMESTRE/2009**

AA001 Turma "A"	Dissertação de Mestrado	
AA002 Turma "A"	Tese de Doutorado	
	DISCIPLINAS PARA O PROGRAMA DE ESTÁGIO DOCENTE (PED)	
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"	Projetos de Cooperação Ementa: Projetos de Cooperação Interinstitucional. ATENÇÃO: SOMENTE OS ALUNOS QUE FAZEM PARTE DO PROJETO PROCAD, PODERÃO MATRICULAR-SE.	Créditos: 02
QP031 Turma "A" Segunda e Quarta 14h às 16h Sala E307 (IQ-16)	"Química Quântica I" Prof. Dr. Yoshiyuki Hase Pré-Req.: QP124/QP125/AA200 (Autorização da Coordenadora de Pós-Graduação) Ementa: Mecânica ondulatória. Operadores e relações de incerteza. Momento angular. Potenciais esfericamente simétricos. Átomos multieletrônico. Álgebra matricial. Métodos de aproximação. Spin. Estrutura atômica. Métodos SCF de Hartree-Fock. Bibliografia: 1) A.K. Chandra, Introductory quantum chemistry, McGraw-Hill Ed., (1989). 2) Atilla Szabo and Neil S. Ostlund, Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, Dover Ed.	Créditos: 04 VAGAS: mínimo: 03 máximo: 30

<p>QP123 Turma "A"</p> <p>Sexta-feira</p> <p>10h às 12h e 16h às 18h Sala IQ-14</p>	<p>"Métodos Modernos de Caracterização Estrutural e Dinâmica de Proteínas"</p> <p>Prof.(s). Dr(s). Ljubica Tasic (Coordenadora), Fábio Cesar Gozzo, Ricardo Aparicio e Munir Salomão Skaf</p> <p>Ementa: Clonagem, expressão, purificação e caracterização espectroscópica de proteínas em solução. Identificação de proteínas, seqüencialmente de peptídeos e caracterização de modificações por espectrometria de massas. Determinação de estruturas tridimensionais por espalhamento e difração de Raios X e luz síncrotron. Validação e deposição de estruturas. Métodos computacionais de caracterização estrutural e dinâmica de proteínas. Dinâmica molecular, modelagem por homologia, docking e desenho racional de drogas.</p> <p>Bibliografia: Módulo I -Molecular Cell Biology. H. Lodish et al., Freeman, 6th Ed., 2006. • Fundamentos de Bioquímica. D. Voet, J. Voet and C. Pratt, Artmed, Porto Alegre, 2000. • Protein NMR Spectroscopy: Principles and Practice, Cavanagh et al., Academic Press, 1996. • Principles of Fluorescence Spectroscopy. J. Lakowicz, Plenum Press, 1983. • Determination of the helix and β-form of proteins in aqueous solution by circular dichroism, Chen, et al. (1974). Biochemistry 13: 3350-3359.</p> <p>Módulo II -• Protein Sequencing and Identification Using Tandem Mass Spectrometry. M. Kinter and N. E. Sherman, 1999. • Mass Spectrometry : Principles and Applications. E. De Hoffmann and V. Stroobant, 1998. • Electrospray Ionization Mass Spectrometry. R. Cole, 1997.</p> <p>Módulo III -• Protein Crystallography (Molecular Biology Series). T. L. Blundell and L. Johnson, Academic Press, 1976. • Crystallization of Biological Macromolecules. A. McPherson, Cold Spring Harbor Laboratory Press, 1999. • Principles of Protein X-ray Crystallography. J. Drenth, Springer Verlag Publishing, 1999. • Protein Crystalization Techniques, Strategies, and Tips. T. Bergfors, Ed., International University Line, 1999. • Small-angle scattering: a view on the properties, structures and structural changes of biological macromolecules in solution. Koch, M.H., Vachette, P. and Svergun, D.I. (2003). Q. Rev. Biophys. 36:147-227. • Recent applications of protein crystallography and structure-guided drug design. Williams, S. P., Kuyper, L. F. and Pearce, K. H. (2005). Curr. Opin. Chem. Biol. 9:371-80. Review.</p> <p>Modulo IV -• Molecular modelling: principles and applications. AR Leach, Prentice Hall, New York, 2001. • Molecular dynamics simulations of biomolecules. Karplus, M. and McCammon, J. A. (2002). Nature Struc. Biol. 9: 646. • Implications of Protein Flexibility for Drug Discovery. Taegue, S. J. (2003). Nature Reviews: Drug Discovery 2: 527-541. • Small Molecule Docking and Scoring. Muegge, I. and Rarey, M. (2001) Reviews in Computational Chemistry 17, 1-60 (2001) • A review of protein-small molecule docking method. Taylor, R. D. S, Jewsbury, P. J. S. and Essex, J. W. S (2002). Journal of Computer-Aided Molecular Design. • Bridging the Protein Sequence-Structure Gap by Structure Predictions. Rost, B. and Sander, C. (1996). Annual Review of Biophysics and Biomolecular Structure.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS:</p> <p>mínimo: 05 máximo: 30</p>
---	---	--

<p>QP124 Turma "A"</p> <p>Terça e Quinta 19h às 21h Sala E-307 (IQ-16)</p>	<p>“Introdução à Química Quântica e Espectroscopia”</p> <p>Prof. Dr. Francisco Benedito Teixeira Pessine</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. Bibliografia: 1-Levine, Ira N., Physical Chemistry, 5.ed. McGraw-Hill, 2001. 2-D.A. McQuarrie, J.D. Simon, Physical Chemistry – A molecular approach, University Science Books, 1999. 3-R.S. Berry, S.A. Rice, J. Ross, Physical Chemistry, John Wiley & Sons, Inc, 2004. 4-G.M. Barrow, Introduction to molecular spectroscopy, Mc-Graw Hill Book Co., 1962.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 02 máximo: 30</p>
<p>QP125 Turma "A"</p> <p>Terça e Quinta 16h às 18h</p> <p>Sala (IQ-03)</p>	<p>“Introdução à Termodinâmica e à Cinética”</p> <p>Prof. Dr. Munir Salomão Skaf</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. 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: 30</p>
<p>QP145 Turma "A"</p> <p>Segunda e Terça 10h às 12h Sala IQ14</p>	<p>“Periodicidade”</p> <p>Prof(s). Dr.(s). Oswaldo Luiz Alves (Coordenador) e André Luiz Barboza Formiga</p> <p>Ementa: Similaridades e dissimilaridades nos elementos do segundo e terceiro período; similaridades e dissimilaridades nos grupos dos elementos dos grupos de postransição. Estudo da formação dos compostos com diferentes estequiometrias no mesmo grupo e formação de ligações múltiplas. Participação (ou não) de orbitais d. Especial ênfase no grupo do carbono e do nitrogênio e nos compostos envolvendo ligações entre elementos destes dois grupos. Compostos aromáticos envolvendo estes grupos. Bibliografia:1-Huheey, J.E. Keiter, E.A., Keiter, R.L. – Principles of Structure and Reactivity, 4.ed., Harper Coillins College Publishers, 1993. 2-Greenwood, N.N. e Earnshaw, A. – Chemistry of the Elements, Maxwwel Macmillan International Editions, 2ed., 1997. 3-Cotton, F.A., Wilkinson, G., Murilo, C.A. e Bochmann, M. – Advanced Inorganic Chemistry, Wiley-Interscience, 6ed., 1999. 4-The Chemistry of Organophosphorus Compounds. Ter and Quinquevalente Phosphorus Acids and Their Derivatives, ed., Frank Hartley, John Wiley and Sons, 1996.5- The Chemistry of Organophosphorus Compounds. Primary, Secondary and Tertiary Phosphines, Polyphosphines and Heterocyclic Organo Phosphorus Compounds, ed. Frank Hartley, John Wiley and Sons, 2006.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 06 máximo: 30</p>

<p>QP220 Turma "A"</p> <p>Segunda e Quarta 16h às 18h Sala E307 (IQ-16)</p>	<p>"Técnicas de Extração para Análises Cromatográficas" (Disciplina de Primeira Metade)</p> <p>Prof. Dr. Fabio Augusto</p> <p>Pré-Req.: QP215/QP216/AA200 (Autorização da Coordenadora de Pós-Graduação)</p> <p>Essa disciplina terá início no dia 17/08/2009 e término dia 15/10/2009 Período de Matrícula: de 06 a 20/07/2009</p> <p>Ementa: Fundamentos dos processos de transferência de fases e extração. Técnicas clássicas e avançadas de extração e concentração. Estudo de casos selecionados.</p> <p>Bibliografia: Janusz Pawliszyn, ed., Sampling and Sample Preparation for Field and Laboratory: Fundamentals and New Directions in Sample Preparation, vol. xxxvii da série "Comprehensive Analytical Chemistry, 1ªed., Amsterdam, Elsevier, 2002.</p>	<p>Créditos: 02</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 15</p>
<p>QP222 Turma "A"</p> <p>Segunda 08h às 10h Sala E-312</p> <p>Quarta 08h às 10h Sala IQ-01</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>Bibliografia: 1-R.M. Silverstein, F.X. Webster e D. J. Kiemle, <i>Spectrometric Identification of Organic Compounds</i>, Wiley, 7ª ed., Chichester, 2005. 2-J. Mohan, <i>Organic Spectroscopy</i>, CRC, New Delhi, 2000. 3-M. Hesse, H. Meyer e B. Zeeh, <i>Spectroscopic Methods in Organic Chemistry</i>, Thieme, Stuttgart, 1997. 4-J.B. Lambert, H.F. Shurvell, D.A. Lightner e R.G. Cooks, <i>Introduction to Organic Spectroscopy</i>, Prentice-Hall, New Jersey, EUA, 1998. 5-D. L. Pavia, G. M. Lampman, G. S. Kriz, <i>Introduction to Spectroscopy. A Guide for Students of Organic Chemistry</i>, 3a. ed., Brooks, Orlando, 2001.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 20</p>
<p>QP227 Turma "A"</p> <p>Quinta-feira 08h às 12h Sala IQ14</p>	<p>"Fundamentos de Química Analítica"</p> <p>Prof(a)s. Dr(a)s. Isabel Cristina Sales Fontes Jardim (Coordenadora), Adriana Vitorino Rossi, José Alberto Fracassi da Silva, Susanne Rath e Lauro Tatsuo Kubota</p> <p>Ementa: Equilíbrio Químico. Íons em Solução. Teoria de Titulações. Seleção de Métodos Analíticos. Estatística aplicada à Química Analítica.</p> <p>Bibliografia: 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 Analítica. Trad. M. Grassi; São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2006. 4. Stumm W, Morgan JJ. Aquatic chemistry. 3rd ed.; Wiley Interscience Pub.; 1996. 5. Butler JN. Ionic equilibrium: solubility and pH calculations. Wiley Interscience Pub.; 1998. 6. Butler, J.N., Ionic Equilibrium: A Mathematical Approach, Addison-Wesley Publish Company, Menlo Park, 1964. 7. Miller, J.C. e Miller, J. N., * Statistics for Analytical Chemistry, Ellis Horwood, New York, Prentice Hall, 1993.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 03 máximo: 20</p>

<p>QP268 Turma "A"</p> <p>Segunda-feira 19h às 21h Sala CB16</p> <p>Quarta-feira 19h às 21h Sala IQ06</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). 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>QP313 Turma "A"</p> <p>Quartas-feiras</p> <p>14h às 18h Sala IQ-14</p>	<p>"Métodos Espectroquímicos de Análise"</p> <p>Prof(s). Dr(s). Marco Aurélio Zezzi Arruda (Coordenador) Ivo Milton Raimundo Junior e Maria Izabel Maretti Silveira Bueno</p> <p>Ementa: Métodos baseados na absorção, emissão e espalhamento da radiação eletromagnética. Sensores óticos. Bibliografia: 1-Skoog, D.A.; Holler, F.J. and Nieman, T.A.; Principles of Instrumental Analysis, 5^a ed., Saunders College Publishing, 1998. 2-Spectrophotometry, luminescence and colour; Science and Compliance Analytical Spectroscopy Library, vol. 6, Elsevier, Amsterdam, 1995. 3-Perkampus, H-H.: UV-VIS spectroscopy and its applications, Springer, 1992. 4-Valeur, B.; Molecular Fluorescence, Wiley-VCH, Weinheim, 2002. 5-Rendell, D.; Fluorescence and phosphorescence spectroscopy, John Wiley, New York, 1987. 6-Wolfbeis, O.S.; Fiber Optic Chemical Sensors and Biosensors, CRC Press, Boca Raton, 1991, vols. 1-2. 7-Janata, J.; Principles of Chemical Sensors, Plenum Press, New York, 1990. 8-Spichiger-Keller, U.E.; Chemical Sensors and Biosensors for Medical and Biological Applications, Wiley-VCH, Weinheim, 1998. 9-Diamond, D.; Principles of Chemical and Biological Sensors, John Wiley, New York, 1998. 10-Williams, P and Norris, K. Near-Infrared Technology – in the Agricultural and Food Industries, 2nd ed., American Association of Cereal Chemists, Inc., St. Paul, 2001. 11-Welz, B. and Sperling, M. ; Atomic Absorption Spectrometry, 3rd ed., Wiley-VCH, Weinheim, 1999. 12-J. Dedina and D.L. Tsalev, Hydride Generation Atomic Absorption Spectrometry, Wiley, Chichester, 1995. 13-A. Montaser and D.W. Golightly(editors), Inductively Coupled Plasmas in Analytical Atomic Spectrometry, 2nd ed., Wiley-VCH, Weinheim, 1992. 14-P.W.J.M. Boumans, ed., Inductively Coupled Plasma Emission Spectroscopy., vols. 1-2, John Wiley, New York, 1987. 15-J.S. Becker, Inorganic Mass Spectrometry, Wiley, Weinheim, 2007.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 03 máximo: 20</p>

<p>QP322 Turma "A"</p> <p>Quartas e Sextas 10h às 12h</p> <p>Sala E-312 (IQ-17)</p>	<p>“Sínteses Orgânicas”</p> <p>Prof(s). Dr(s). Paulo Cesar Muniz de Lacerda Miranda (Coordenador), Fernando Antônio Santos Coelho, Carlos Roque Duarte Correia e Anita Jocelyne Marsaioli, Ronaldo Aloise Pilli</p> <p>Pré-Req.: QP021/AA200 (Autorização da Coordenadora de Pós-Graduação)</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>Bibliografia: 1. Wyatt, P. e Warren, S. “<i>Organic Synthesis: Strategy and Control</i>”, John Wiley & Sons, 1ª edição, Chippenham, Grã-Bretanha, 2007, 918 páginas, ISBN: 0-471-48940-5. 2. Smith, M. B. “<i>Organic Synthesis</i>”, McGraw-Hill, 2ª edição, Singapura, 2001, 1416 páginas, ISBN: 0-070-48242-5. 3. Carey, F. A. e Sundberg, R. J. “<i>Advanced Organic Chemistry, Part B: Reaction and Synthesis</i>”, Springer Verlag, 5ª edição, New York, EUA, 2008, 1322 páginas, ISBN: 0-387-68350-8. 4. Carruthers, W. e Coldham, I., “<i>Modern Methods of Organic Synthesis</i>”, Cambridge University Press, 5ª edição, Cambridge, Grã-Bretanha, 2004, 506 páginas, ISBN: 0-521-77830-5. 5. Hudlicky, T. e Reed, J. W. “<i>The Way of Synthesis: Evolution of Design and Methods for Natural Products</i>”, Wiley-VCH, 1ª edição, Weinheim, Alemanha, 2007, 1032 páginas, ISBN: 3-527-31444-7. 6. Boger, D. L. “<i>Modern Organic Synthesis: Lecture Notes</i>”, TSRI Press, 1ª edição, San Diego, EUA, 1999, 476 páginas, ASIN: B0006RAVMY.</p> <p>BIBLIOGRAFIA SUPLEMENTAR</p> <p>1. Trost, B. M. e Fleming, I. “<i>Comprehensive Organic Synthesis</i>”, Nove volumes, Pergamon Press, Nove volumes, 1ª edição, 1991, ISBN: 0-080-35929-8. 2. Helmchen, G.; Hoffmann, R.; Mulzer, J. e Schaumann, E. “<i>Houben-Weyl Methods in Organic Chemistry: Stereoselective Synthesis</i>”, Georg Thieme Verlag, 1ª edição, 1996, 840 páginas, ISBN: 3-131-02794-8. 3. Artigos atuais em periódicos indexados correlacionados com temas da ementa.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 25</p>
--	--	---

<p>QP413 Turma "T"</p> <p>Terça-feira 08h às 12h Sala F-10(IQ-10)</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Analítica I "Química Aquática"</p> <p>Prof(s). Dr(s). Anne Hélène Fostier (Coordenadora) e Wilson de Figueiredo Jardim</p> <p>Ementa: Parte Teórica: 1-Introdução: ciclo da água, composição química das águas naturais, águas subterrâneas e águas superficiais, água doce e água salgada. 2-Acidez das águas: sistemas abertos e sistemas fechados: $\text{CO}_2/\text{HCO}_3^-/\text{CO}_3^{2-}$ 3-Interface água-atmosfera: trocas nesta interface. 4-Exemplos de cálculos. 4-Contaminantes orgânicos em água. 5-Químicos naturais em água: transporte, tempo de residência, complexação, distribuição e suas implicações. 6-Química redox em água: diagrama PE-pH e suas interpretações ambientais.</p> <p>Parte Prática:1-Especiação 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. 2-Aplicação da química redox: propriedade redutivas do $\text{Fe}(0)$. 3-Determinação de cafeína em águas naturais por HPLC.</p> <p>Bibliografia: 1- Stumm W. & Morgan J.J., Aquatic Chemistry – Wiley-Interscience Publication, J. Wiley & Sons, Inc., 1996. 2-Howard, A.G., Aquatic Environmental Chemistry, Oxford Science Publications, Oxford University Press, 1998.</p>	<p>Créditos: 04 VAGAS: mínimo: 04 máximo: 16</p>
<p>QP423 Turma "T"</p> <p>Terça e Quinta 10h às 12h Sala E-312(IQ-17)</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Orgânica I "Química Medicinal: Mecanismos de Ação e Síntese de Fármacos"</p> <p>Prof. Dr. Fernando Antônio Santos Coelho</p> <p>Ementa: 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 antimalaricais: 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> <p>Bibliografia: G.L., Patrick, An Introduction to Medicinal Chemistry, Oxford University Press, 2001, 3.ed. 2- Silverman, R.B., The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action, Academic Press Inc., 1992. 3- Gringauz, A., Introduction to Medicinal Chemistry, Wiley, 1996. 4- Wermuth, C.G., The Practice of Medicinal Chemistry, Academic Press, 1996. 5-Goodman and Gillman, The Pharmacological Basis of Therapeutics, 9.ed., McGraw-Hill, 1996.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 08 máximo: 30</p>

<p>QP433 Turma "T"</p> <p>Segunda e Quarta 16h às 18h Sala F-10 (IQ-10)</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química I "Introdução à Mecânica Estatística"</p> <p>Prof. Dr. Munir Salomão Skaf</p> <p>Pré-Req.: QP124/QP125/AA200 (Autorização da Coordenadora de Pós-Graduação)</p> <p>Ementa: 1. Introdução aos princípios básicos da Mecânica Estatística. a) O que é e para que serve. b) Microestados, configurações e ensembles: A entropia é desvendada. c) A configuração mais provável, o máximo da entropia e a distribuição de Boltzmann. d) Funções de partição e flutuações: a conexão com a termodinâmica. 2. Revisão das mecânicas clássica e quântica. a) Formulações de Newton, Lagrange e Hamilton (mec. clássica). b) Mecânica de muitos corpos e dinâmica de corpos rígidos (mec. clássica). c) Estados quânticos e quantização da energia (mec. quântica). d) Partícula livre, osciladores, rotores livres (quântico vs. Clássico). e) Interações intermoleculares. 3. Mecânica estatística de partículas independentes. a) Gases ideais: Distribuição de Maxwell-Boltzmann. b) Gases ideais poliatômicos: Aplicação à espectroscopia. c. Equilíbrio químico: Uma Visão microscópica. d) O princípio de Pauli afeta a distribuição de energia de um sistema: Estatísticas de Fermi-Dirac e Bose-Einstein. e) Sólidos cristalinos ideais, radiação de corpo negro. 4. Mecânica estatística de partículas interagentes. a) gases imperfeitos, teoria de van der Waals. b) Potenciais intermoleculares de interação. c) O estado líquido da matéria. d) Funções de distribuição: caracterização da estrutura de líquidos. e) Teoria de perturbação em líquidos. . f) Soluções iônicas: Fundamentos microscópicos da teoria de Debye-Huckel. g) Propriedades de transporte e dinâmica molecular: Funções de correlação temporal. h) Processos de relaxação coletivos: Relaxação dielétrica e espalhamento de luz. 5. Métodos computacionais para o estudo de fases condensadas. a) O método de Monte Carlo. b) O método da dinâmica molecular. c) Diferenças e semelhanças entre MC e MD. d) Algoritmos e técnicas avançadas de MD: Sistemas moleculares rígidos e flexíveis. e) Líquidos polares e tratamento de forças de longo alcance. f) Solventes clássicos.</p> <p>Bibliografia: D.A. MacQuarrie, Harper & Row (2001). M.P. Allen & D.J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Oxford (1996). A.R. Leach, Molecular Modeling: Principles and Applications, 2006.</p>	<p>Créditos: 04 VAGAS: mínimo: 01 máximo: 30</p>
--	--	--

<p>QP443 Turma "T"</p> <p>Segunda e Quarta 16h às 18h Sala E-312 (IQ-17)</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica I "Aditivção de Polímeros"</p> <p>Prof. Dr. Marco-Aurelio De Paoli</p> <p>Ementa: 1-Principais polímeros disponíveis no Brasil, uma visão do mercado. 2-Principais matérias primas e seus diferentes <i>grades</i>. 3-Tipos de polímeros, blendas, compósitos e IPN. 4-Aspectos difusionais e toxicológicos relacionados com os aditivos para polímeros. 5-Formulação: Definição, Componentes de uma formulação: aditivos, cargas, agentes de reforço e modificadores. 6-Principais tipos de aditivos para termoplásticos e suas funções: estabilizantes, plastificantes, lubrificantes, agentes antiestáticos, agentes anti-fogging, retardantes de chama, pigmentos e corantes, agentes de expansão e espumantes, nucleantes, modificadores de impacto, biocidas. 7- Principais tipos de cargas: Cargas de enchimento. Cargas de reforço e auto-reforço. Cargas funcionais. Compósitos e Nanocompósitos. 8-Preparação da formulação de um termoplástico: Máster-batch. Pré-mistura. Dosagem na alimentação. Processamento reativo. 9-Formulação de borrachas: Tipos de borrachas disponíveis no mercado brasileiro e suas diferentes propriedades. Componentes da formulação: cargas, agentes de reforço, agentes de reticulação, aceleradores e estabilizantes. Preparação da formulação por mistura dispersiva: misturador tipo Brabender e moinho aberto de rolos. Vulcanização, maquinário usado para produzir pneus. 10-Conclusões e avaliação final.</p> <p>Bibliografia: 1-M. Rabello, "Aditivção de Polímeros", Artliber e ABPol editoras, São Paulo, 2000. 2-Plastics Additives Handbook, editado por R. Gächter e H Muller, Hanser Publishers, Viena, 1984.3-Plastics Additives Handbook, editado por H. Zweifel, Hanser Publishers, Viena, 2001. 4-Página da web: www.specialchem.com 5-Página da web: www.vulcanizar.com.br</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 04 máximo: 20</p>
---	---	---

<p>QP446 Turma "T"</p> <p>Terça-feira</p> <p>16h às 18h Sala F-10 (IQ-10)</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica IV "Métodos Físicos Aplicados à Sólidos"</p> <p>Prof(s). Dr(s). Oswaldo Luiz Alves (Coordenador), Fernando Aparecido Sigoli e Antonio Gomes Souza Filho (Pós-Doutorado)</p> <p>Ementa: 1. Espectroscopia FTIR: aspectos básicos, amostragem equipamentos e aplicações. 2. Espectroscopia Raman: aspectos básicos, aplicações, Efeito Raman Ressonante (ERR) e Efeito Raman Intensificado por Superfícies (SERS). 3. Luminescência: fenômeno, parâmetros de medida. Instrumentação e aplicação. 4. EXAFS: aspectos básicos e aplicações.</p> <p>Bibliografia: 1- O.L. Alves, "Espectroscopia Infravermelho com Transformada de Fourier: Feliz Combinação de velhos conhecimentos de óptica, matemática e informática" em http://lges.iqm.unicamp.br/images/vivencia_lges_meprotec_espec_fourier.pdf - 2-D. A Long, "The Raman Effect: A Unified Treatment of the Theory of Raman Scattering by Molecules, Wiley, 2001. 3-A. H . Kitai, "Solid State Luminescence. Theory, materials and devices", Chapman & Hall, 1993. 4-I.O. Mazali," EXAFS como Técnica de Caracterização Estrutural de Materiais: Fundamentos Teóricos e Aplicações", http://lges.iqm.unicamp.br/images/vivencia_lges_monografias_italo_exafs.pdf</p>	<p>Créditos: 02 VAGAS: mínimo: 05 máximo: 15</p>
<p>QP832 Turma "T"</p> <p>Quarta e Sexta 08h às 10h Sala IQ-14</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química VIII "Física de Polímeros"</p> <p>Profa. Dra. Maria Isabel Felisberti</p> <p>Pré-Req.: QP124/QP125/AA200 (Autorização da Coordenadora de Pós-Graduação)</p> <p>Ementa: Mecanismos de relaxações em polímeros. Modelos fenomenológicos. Transições de fase. Elasticidade da borracha. Soluções poliméricas. Difusão. Morfologia.</p> <p>Bibliografia: 1-Ulrich Eisele, - Introduction to Polymer Physics, Springer Verlag, Berlin, 1990. 2-L.H. Sperling, Introduction to Physical Polymer Science, John Wiley & Sons, N.Y., 1985. 3-J.V. Dawkins, ed., Developments in Polymer Characterization, Applied Science Publishers Ltd, Londres, 1983, Volumes de 1 a 5. 6-Paul J. Flory, Principles of Polymer Chemistry, Cornell University Press, Ithaca, 13ª ed., 1986. 7-I.M. Ward, Mechanical Properties of Solid Polymers, John Wiley & Sons, Chichester, 2ª ed., 1990. 8-Lawrence Nielsen, Mechanical Properties of Polymers and Composites, Marcel Dekker, Inc., N.Y., 1974. 9-R.N. Haward, R.J., Young, The Physics of Gassy Polymers, Chapman & Hall, London, 2.ed., 1997. 10-Hans-Georg Elias, An Introduction to Polymer Science, VCH, Weinheim, 1ª ed., 1997. 11-M. Doi, S.F. Edwards, The Theory of Polymer Dynamics, Clarendon Press, Oxford, 1992.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 03 máximo: 20</p>

INÍCIO DO SEMESTRE: 17/08/2009
TÉRMINO DO SEMESTRE: 17/12/2009