

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA
PÓS-GRADUAÇÃO

DISCIPLINAS OFERECIDAS NO 2º SEMESTRE/2011

<p>QP436 Turma "Y"</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química IV "Espalhamento de Luz: Estático e Dinâmico"</p> <p>Prof. Dr. René Alfonso Nome Silva (IQ-UNICAMP) Prof. Dr. Alvaro Vianna Novaes de Carvalho Teixeira (UFV) Prof. Dr. Fernando Carlos Giacomelli (UFABC)</p> <p>CURSO MINISTRADO INTERNAMENTE NO PERÍODO DE: 07 a 10 DE FEVEREIRO DE 2011. SOMENTE OS ALUNOS QUE PARTICIPARAM DO CURSO PODERÃO MATRICULAR-SE.</p> <p>Ementa: Revisão: ondas eletromagnéticas, interação onda-matéria. Espalhamento Rayleigh: espalhamento por um elétron, moléculas e macromoléculas. Determinação de raio de giração, massa molar média ponderada, 2o. coeficiente virial (gráfico de Zimm). Construindo um equipamento de espalhamento de luz + Apresentação do equipamento. Continuação da apresentação do equipamento. Tratamento dos dados envolvendo medidas de espalhamento de luz estático: Método de Zimm, Berry e Guinier, Método da Dissimetria. Preparação de amostras. Exemplo de um experimento de espalhamento estático e análise de dados. Flutuações de intensidade - Funções correlação. Espalhamento dinâmico. Diferenças relativas no equipamento para o espalhamento dinâmico. Experimento de espalhamento dinâmico. Modelos: exponencial, método de cumulantes, métodos usando transformada inversa de Laplace.</p> <p>Bibliografia:</p> <ol style="list-style-type: none">1. C. Tanford, "Physical Chemistry of Macromolecules", 1961.2. W. Scharf, "Light scattering from Polymer solutions and nanoparticle dispersions".3. B. Berne, R. Pecora, "Dynamic Light Scattering".	<p>Créditos: 01</p> <p>VAGAS: mínimo: 04 máximo: 33</p>
-----------------------------------	--	---

<p>QP812 Turma "Y"</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Analítica VIII "Espectroscopia no Infravermelho"</p> <p>Prof. Dr. Celio Pasquini</p> <p>CURSO A SER MINISTRADO INTERNAMENTE NO PERÍODO DE: 18 a 22 DE JULHO DE 2011. SOMENTE OS ALUNOS QUE PARTICIPARÃO DO CURSO PODERÃO MATRICULAR-SE.</p> <p>Ementa: Fundamentos da espectroscopia. Espectroscopia Vibracional. Aspectos Históricos. Osciladores harmônicos e anarmônicos. Tutorial - Absorção da radiação IV e NIR. Instrumentação espectrofotométrica para a região NIR. Instrumentos com transformada de Fourier. Comparação entre Espectrofotômetros NIR. Técnicas de medidas espectrais no infravermelho próximo. Espectros de transmitância, absorbância e reflectância difusa. Análise (qualitativa e quantitativa) e interpretação de espectros NIR. A necessidade de técnicas multivariadas para tratamento de dados NIR. Exemplos de uso da espectroscopia NIR na indústria.</p> <p>Bibliografia: 1. Phil Williams and Karl Norris, Near-Infrared Technology in the Agricultural and Food Industries, 2nd ed., AACC Inc, St. Paul, MI, 2001. 2. Donald A. Burns and Emil W. Ciurczak, Handbook of Near-Infrared Analysis, 2nd ed. Marcel Dekker, Inc., New York, 2001. 3. L.G. Weyer, Near-Infrared Spectroscopy of Organic Substances, Appl. spectrosc. Rev., 21, 1-43 (1985). 4. J.J.Workman Jr., Interpretative Spectroscopy for Near Infrared, Appl. Spectrosc. Rev., 31, 251-320 (1996). 5. L. Bokobza, Near Infrared Spectroscopy, J. NIRS, 6, 3-17 (1998). 6. C. Pasquini, Near Infrared Spectroscopy: Fundamentals, Practical Aspects and Analytical Applications, J. Braz. Chem. Soc., 14, 198-219 (2003). 7. T. Naes, T. Isaksson, T. Fearn and T. Davies, Multivariate Calibration and Classification, NIR Publication, UK, 2002.</p>	<p>Créditos: 02</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 15</p>
-----------------------------------	--	---

DISCIPLINAS OFERECIDAS NO 2º SEMESTRE/2011

ATENÇÃO: A MATRÍCULA EM DISCIPLINAS PARA ALUNOS REGULARES SERÁ DE 02 A 19 DE JULHO

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"	Projetos de Cooperação Ementa: Projetos de Cooperação Interinstitucional. ATENÇÃO: SOMENTE OS ALUNOS QUE FAZEM PARTE DO PROJETO PROCAD PODERÃO SE MATRICULAR	Créditos: 02
QP031 Turma "A" Terça e Quinta 14h às 16h Sala: IQ-13	“Química Quântica I” Prof. Dr. Nelson Henrique Morgon e Rogério Custódio Pré-Req.: QP124/QP125/AA200 (Autorização da Coordenadora de Pós-Graduação) Ementa: Mecânica ondulatória. Operadores e relações de com incerteza. Momento angular. Potenciais esfericamente simétricos. Átomo multieletrônico. Álgebra matricial. Métodos de aproximação. Spim. Estrutura atômica. Método 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: 20
QP123 Turma "A" Quarta e Sexta 08h às 10h Sala: E-312 (IQ17)	“Métodos Modernos de Caracterização Estrutural e Dinâmica de Proteínas” Prof.(s). Dr(s). Ljubica Tasic (Coordenadora), Fábio Cesar Gozzo, Ricardo Aparicio e Munir Salomão Skaf 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.	Créditos: 04 VAGAS: mínimo: 05 máximo: 20

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.

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.

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 Crystallization 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.

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>QP124 Turma "A"</p> <p>Segunda e Quarta 16h às 18h</p> <p>Sala: IQ-13</p>	<p>"Introdução à Química Quântica e Espectroscopia"</p> <p>Prof. Dr. Pedro Antonio Muniz Vasquez</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>Terça 08h às 10h Quinta 16h às 18h</p> <p>Sala: IQ-13</p>	<p>"Introdução à Termodinâmica e à Cinética"</p> <p>Prof.(s). Dr(s). Inés Joeques (Coordenadora) e Renato Atilio Jorge</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>QP145 Turma "A"</p> <p>Segunda e Terça 10h às 12h</p> <p>Sala: F-10 (IQ-10)</p>	<p>"Periodicidade"</p> <p>Prof. Dr. Oswaldo Luiz Alves</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.</p> <p>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>QP212 Turma "A"</p> <p>Quarta e Quinta 10h às 12h</p> <p>Sala: E-307 (IQ-16)</p>	<p>“Métodos Eletroquímicos de Análise”</p> <p>Prof(s). Dr(s). Lauro Tatsuo Kubota (Coordenador), José Alberto Fracassi da Silva.</p> <p>Ementa: Introdução aos métodos eletroquímicos de análise. Potenciometria, Coulometria, Voltametria, Mecanismos de reações eletroquímicas, Ultramicroeletrodos, Técnicas de Pré-concentração. Cronopotenciometria, Espectroscopia de Impedância Eletroquímica, Sensores e Biossensores.</p> <p>Bibliografia: 1. T. Edmonds (Ed.), <i>Chemical Sensors</i>, Blackie, Glasgow, 1988. 2. A J. Bard and L.R. Faulkner, <i>Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications</i>, second edition, John Wiley & Sons, New York, 2001. 3. P.T. Kissinger and W.R. Henieman (Eds), <i>Laboratory Techniques in Electroanalytical Chemistry</i>, 2nd ed. Marcel Dekker, New York, 1996. 4. R.W. Murray, <i>Chemically Modified Electrodes in A J. Bard (Ed) Electroanalytical Chemistry</i>, vol. 13, Marcel Dekker, New York, 1984. 5. R.W. Murray, <i>Molecular Design of Electrode Surfaces</i>, vol 22, John Wiley & Sons, New York, 1992. 6. D.R. Crow, <i>Principles and Applications of Electrochemistry</i>, Third edition, Chapman & Hall, London, 1988. 7. K. Brainina and E. Neyman, <i>Electroanalytical Stripping Methods</i>, vol 126, John Wiley & Sons, New York, 1993. 8. K.B. Oldham and J.C. Myland, <i>Fundamentals of Electrochemical Science</i>, Academic Press, Inc. London, 1994. 9. D. Pletcher and F.C. Walsh, <i>Industrial Electrochemistry</i>, second edition, Blackie Academic & Professional, 1990. 10. J.A. Plambeck, <i>Electroanalytical Chemistry: Basic Principles and Applications</i>, John Wiley & Sons, New York, 1982. 11. P.L. Bailey, <i>Analysis with Ion Selective Electrodes</i>, 2nd Edition, Hayden & Sons, 1980. 12. Southampton Electrochemistry Group: <i>Instrumental Methods in Electrochemistry</i>, John Wiley & Sons, New York, 1985. 13. R.L. McCreery, <i>Electroanalytical Chemistry</i>, A.J. Bard (Ed) vol 17, Marcel Dekker, Inc., New York, 1991. 14. A. M. Bond, <i>Modern Polarography Methods in Analytical Chemistry</i>, Marcel Dekker, New York, 1980. 15. I.M. Kolthoff and J.J. Lingane, <i>Polarography</i>, 2nd Edition, Wiley-Interscience, New York, 1952.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 03 máximo: 12</p>
<p>QP222 Turma "A"</p> <p>Segunda e Quarta 10h às 12h</p> <p>Sala: IQ-06</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>Terça e Quinta 14h às 16h</p> <p>Sala: E-312 (IQ-17)</p>	<p>"Fundamentos de Química Analítica"</p> <p>Prof(a)s. Dr(a)s. Dosil Pereira de Jesus (Coordenador), Fabio Augusto, Lauro Tatsuo Kubota, Matthieu Tubino e Marco Aurélio Zezzi Arruda</p> <p>Ementa: Equilíbrio Químico. Íons em Solução. Teoria de Titulações. Seleção de Métodos Analíticos. Estatística aplicada à Química Analítica.</p> <p>Bibliografia:</p> <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 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. 8. Harris, DC, Análise Química Quantitativa. Rio de Janeiro: LTC Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2008. 9. Wänninen EV, Ingman F. Metal buffers in chemical-analysis .1. Theoretical considerations. Pure and Applied Chemistry, 1987, 59(12): 1681-1692. 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>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 16</p>
<p>QP313 Turma "A"</p> <p>Terça e Quinta 10h às 121h</p> <p>Sala: E-312(IQ-17)</p>	<p>"Métodos Espectroquímicos de Análise"</p> <p>Prof(s). Dr(s). Solange Cadore (Coordenadora), Ivo Milton Raimundo Junior e Maria Izabel Maretti Silveira Bueno</p> <p>ATENÇÃO: A SALA FOI ALTERADA INTERNAMENTE. NA DAC ESTARÁ CONSTANDO A SALA ANTIGA.</p> <p>Ementa: Métodos baseados na absorção, emissão e espalhamento da radiação eletromagnética. Sensores óticos.</p> <p>Bibliografia: 1-Skoog, D.A.; Holler, F.J. and Nieman, T.A.; Principles of Instrumental Analysis, 5ª 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: 05 máximo: 25</p>

<p>QP422 Turma "A"</p> <p>Quarta e Sexta 14h às 16h</p> <p>Sala: E-312 (IQ-17)</p>	<p>"Introdução à Espectrometria de Massas"</p> <p>Prof. Dr. Fábio Cesar Gozzo</p> <p>Ementa: Técnicas de ionização: ionização por elétrons (EI), ionização química (CI), FAB "Fast-Atom-Bombardment", MALDI "Matrix- Assisted Laser Desorption Ionization", ESI "Electron-Spray Ionization". Técnicas/instrumentos de análise de relações m/z: analisadores magnéticos e eletrostáticos BE, EB e suas combinações, quadrupolos e multipladeupolos, "Íon-Traps" (ICR,QIT), tempo de voo (TOF). Detecção de íons: Conceitos gerais: resolução, transmissão, modos de varredura. Análise/interpretação de espectros de massas: íon molecular -isótopos, fragmentação - mecanismos, caracterização de compostos e classes de compostos: Outras técnicas: GC/MS,LC/MS, MS/MS, MS/MS/MS, MSn, CID ("Collision-Induced Dissociation"), MIMS ("Membarne-Introduction Mass Spectrometry"). A química de íons na fase gasosa: reações de síntese e de análise estrutural, propriedades termodinâmicas, diferenciação de isômeros, funcionalização de íons e moléculas neutras.</p> <p>Bibliografia: 1.Mass spectrometry : principles and applications / Edmond de Hoffmann, Vincent Stroobant. 2. Introduction to mass spectrometry / J. Throck Watson.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 04 máximo: 30</p>
<p>QP423 Turma "Y"</p> <p>Segunda e Quarta 14h às 16h</p> <p>Sala: E-307 (IQ-16)</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Orgânica I "Química Medicinal: Mecanismos de Ação e Síntese de Fármacos"</p> <p>Prof(s). Dr(s). Fernando Antonio Santos Coelho (Coordenador) e Wanda Pereira Almeida</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 antimalariais: 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: 1- G.L., Patrick, An Introduction to Medicinal Chemistry, Oxford University Presss, 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: 05 máximo: 30</p>
<p>QP433 Turma "Y"</p> <p>Terça e Sexta 16h às 18h</p> <p>Sala: E-312(IQ-17)</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química I "Reologia de Sistemas Coloidais"</p> <p>Pré-Req.: QP124/QP125/AA200 (Autorização da Coordenadora de Pós-Graduação)</p> <p>Prof. Dr. Edvaldo Sabadini</p> <p>Ementa: Introdução a reologia. Definições de parâmetros reológicos fundamentais como deformação, tensão e taxa de cisalhamento. Elasticidade e viscosidade. A viscoelasticidade linear e no linear de sistemas coloidais sob o ponto de vista fenomenológico e</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 03 máximo: 15</p>

	<p>microestrutural. Aspectos instrumentais da reologia de sistemas coloidais: teoria e prática.</p> <p>Bibliografia:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Goodwin, J. W, and Hughes, R. W. Rheology for Chemistry RSC. 2. Macosko, C. W. Rheology - Principles, Measurements, and Applications Wiley- VCH. 3. Larson, R. G. The Sturcture and Rheology of Complex Fluids, Oxford University Press. 	
<p>QP444 Turma "Y"</p> <p>Terça 19h às 23h</p> <p>Sala: E-312 (IQ-17)</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica II "Ressonância Magnética Nuclear"</p> <p>Prof. Dr. Alviclér Magalhães</p> <p>Ementa:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Preparo de amostras para análise por RMN em solução - Empacotamento de amostra – Estado sólido e semi-sólidos, polímeros e tecidos vegetal e animal - Cuidados básicos com espectrômetros de RMN - Operação básica de um espectrômetro de RMN para aquisição de espectros em 1D e 2D <ul style="list-style-type: none"> • Ajustes básicos (Temperatura, Lock, Shimming, Tuning, Matching) • Ajuste dos parâmetros básicos de aquisição e processamento (largura espectral, transmissor, ajuste do receptor, ajuste de fase, linha base, etc.). • Supressão de sinal de solvente • Medidas de tempos de relaxação e difusão • Rotações no ângulo mágico - MAS • Desacoplamento homo e heteronuclear • Interpretação das seqüências de pulsos- conceitos básicos • Pulsos formatados de excitação seletiva – conceitos básicos • Escolhendo compostos de referencia • Calibração de pulsos de rádio-frequência - Experimentos em 1D: <ul style="list-style-type: none"> • Aquisição de espectros de RMN de ^1H, ^{13}C, ^{19}F, ^{31}P, ^{29}Si, ^{15}N, ^{51}V, ^{127}I, ^7Li, ^{23}Na, ^{87}Rb, ^{199}Hg, ^{119}Sn, entre outros para amostras sólidas e em solução. • APT, DEPT, INEPT • 1D-NOESY, 1D-ROESY e 1D-TOCSY • QCPMG • HRMAS • Dinâmica estrutural via RMN - Experimentos em 2D: <ul style="list-style-type: none"> • COSY, TOCSY, NOESY, ROESY, DOSY, T1 e T2 • HSQC, HSQC-TOCSY, HSCQ-EDITADO e HMBC ($^1\text{Hx}^{13}\text{C}$, $^1\text{Hx}^{31}\text{P}$, $^1\text{Hx}^{15}\text{N}$...) • Experimentos seletivos em 2D • Correlações em espectroscopia no estado sólido • HETCOR – FSLG • CP/MAS, HPDEC, CRAMPS - Processamento de espectros <ul style="list-style-type: none"> • Manipulação do FID • Funções de apodização • Uso de programas para processamento de espectros • Interpretação de espectros 1D e 2D • Preparo de figuras - Espectros de complexos dia e paramagnéticos, (cobalto, níquel e cromo) - Avanços recentes na área <p>Bibliografia:</p> <p>NMR - From Spectra to Structures -An Experimental Approach, Mitchell, Terence N., Costisella, Burkhard - Springer; 2nd</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 20</p>

	<p>rev.and exp.ed. edition (2007)</p> <p>200 and More NMR experiments, A practical Course, Stefan Berger and Segmar Braun, Wiley-VCH, (1997)</p> <p>High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry, Timothy D. W. Claridge, Volume 27, Second Edition Elsevier Science; 2 edition (2008)</p> <p>NMR Spectroscopy: Processing Strategies - Second Updated Edition- Peter Bigler – Wiley-VCH; 2 edition (2000).</p> <p>NMR CRYSTALLOGRAPHY, Robin K, Harris, Roderick E. Wasylishen, Melinda J. Duer, Wiley, EMR, 2009</p> <p>NMR Spectroscopy in Pharmaceutical Analysis, Ulrike Holzgrabe, Iwona Wawer, Bernd Diehl, Elsevier, (2008)</p> <p>Solving Problems With NMR Spectroscopy, Atta-ur- Rahman, Muhammad Choudhary - Academic Press; 1 edition (1996).</p> <p>Organic Structure Determination Using 2-D NMR Spectroscopy: A Problem-Based Approach (Advanced Organic Chemistry), Jeffrey H. Simpson - Academic Press; 1 edition (2008).</p> <p>Introduction to Spectroscopy: A Guide for Students of Organic Chemistry, Donald L. Pavia, Gary M. Lampman, George S. Kriz - Harcourt College Pub; 2nd edition (1996).</p> <p>Understanding NMR Spectroscopy, Wiley, Chichester, J. Keeler, (2005)</p> <p>Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance, Levitt, M.H. (2002) Pharmaceutical Analysis, Lee, D.C.; Webb, M. Blackwell (2003).</p> <p>Ressonância Magnética Nuclear – Fundamentos, métodos e aplicações. GIL, V.M.S. & GERALDES, C.F.G.C. Fundação Calouste Gulbenkian. Lisboa. (1987).</p> <p>Two Dimensional NMR Spectroscopy, Applications for Chemists and Biochemists Croasmun, W. R.; Carlson, R. M., Editores, 2nd. (2003)</p>	
<p>QP832 Turma "Y"</p> <p>Segunda e Quarta 16h às 18h</p> <p>Sala: F-10 (IQ-10)</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química VIII "Física de Polímeros"</p> <p>Pré-Req.: QP124/QP125/AA200 (Autorização da Coordenadora de Pós-Graduação)</p> <p>Profa. Dra. Maria Isabel Felisberti</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, 13^a ed., 1986. 7- I.M. Ward, Mechanical Properties of Solid Polymers, John Wiley & Sons, Chichester, 2^a 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, 1^a ed., 1997. 11-M. Doi, S.F. Edwards, The Theory of Polymer Dynamics, Clarendon Press, Oxford, 1992.</p>	<p>Crédito: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 01 máximo: 10</p>

<p>QP934 Turma "Y"</p> <p>Quinta 14h às 18h</p> <p>Sala: E-307 (IQ-16)</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química X "Experimentação no Ensino de Ciências"</p> <p>Prof. Dr. José de Alencar Simoni</p> <p>Ementa:</p> <p>a- Discussão em sala de aula</p> <ol style="list-style-type: none"> 1- Evolução histórica do Laboratório de Ensino e sua relação com algumas teorias do Conhecimento 2- O papel do relatório, da comunicação oral e da apresentação de pôster no processo ensino-aprendizagem na atividade experimental. 3- A regra do pré-relatório e pós-sessão no ensino experimental. 4- O uso de mapas conceituais na concepção da atividade experimental. 5- Objetivos, obstáculos e restrições ao sucesso da atividade experimental. 6- Estilos de relatórios. 7- Avaliação (prática e teórica) da atividade experimental e da aprendizagem a ela associada. 8- Laboratório Virtual e ensino à distância. 9- Descritores para estilos de laboratórios, segundo Domin e outros. 10- O laboratório como lugar central/único da aprendizagem de ciências. 11- Avaliação de material didático voltado ao ensino experimental (materiais, livros e revistas). <p>b- Atividade Prática</p> <ol style="list-style-type: none"> 1- Presenciando e discutindo atividades experimentais no ensino de ciências nos níveis: fundamental, médio e superior. 2- Corrigindo relatórios e provas de uma disciplina experimental. 3- Transformando um estilo de laboratório em outro. 4- Aspectos de segurança no laboratório e na atividade de aula. 5- Planejando e executando uma atividade experimental no laboratório investigatório. <p>Bibliografia: Journal of Chemical Education Chemical Educator Química Nova na Escola Ensenanza de las Ciencias Education in Chemistry</p>	<p>Crédito: 04</p> <p>VAGAS: Mínimo: 06 Máximo: 15</p>
---	--	--

INÍCIO DO SEMESTRE: 02 de agosto de 2011
TÉRMINO DO SEMESTRE: 07 de dezembro de 2011