

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA
PÓS-GRADUAÇÃO**

DISCIPLINAS OFERECIDAS NAS FÉRIAS DE INVERNO

ATENÇÃO: A MATRÍCULA PARA A DISCIPLINA DE INVERNO DEVERÁ SER FEITA NOS DIAS 26 E 27 DE JUNHO

<p>QP424 Turma "C"</p> <p>Horário: Das 09h00 às 12h00 e das 14h00 às 17h00</p> <p>Sala IQ05</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Orgânica II - "Understanding NMR Spectroscopy"</p> <p>O CURSO SERÁ MINISTRADO INTERNAMENTE NO PERÍODO DE 22 DE JULHO A 26 DO MESMO MÊS. AS INSCRIÇÕES JÁ FORAM ENCERRADAS. SOMENTE ALUNOS INSCRITOS PODERÃO SE MATRICULAR.</p> <p>Prof. Dr. Cláudio Francisco Tormena (Coord.) e Prof. Dr. James Keeler (Universidade de Cambridge – Inglaterra)</p> <p>Ementa: Energy levels and NMR spectra The vector model Fourier transformation and data processing Product operators Two-dimensional NMR Relaxation and the NOE Coherence selection: phase cycling and field gradient pulses</p> <p>Bibliografia: Keeler's book Understanding NMR Spectroscopy (second edition, Wiley, 2010, ISBN: 978-0-470-74608-0)</p>	<p>Créditos: 02</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 40</p>
--	--	---

DISCIPLINAS OFERECIDAS NO 2º SEMESTRE/2013

ATENÇÃO: A MATRÍCULA EM DISCIPLINAS PARA ALUNOS REGULARES SERÁ DE 01 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)		
CD002/J	Programa de Estágio Docente (Grupo B)	Créditos: 04
CD003/J	Programa de Estágio Docente (Grupo C)	Créditos: 02
QP137/A SEMINÁRIOS	Mestrado Frequentar, no mínimo 15 Seminários durante os três primeiros semestres do curso e ao início do terceiro semestres deverá se matricular na disciplina QP137/A para registro do comprimento desta exigência.	Créditos: 02

QP136/A SEMINÁRIOS	Doutorado Frequentar, no mínimo 30 Seminários durante os seis primeiros semestres do curso e ao início do sexto semestres deverá se matricular na disciplina QP136/A para registro do comprimento desta exigência.	Créditos: 04
-----------------------	--	--------------

<p>QP123 Turma "A"</p> <p>Segunda e quarta-feira 08h às 10h</p> <p>Sala: E312 (IQ11)</p>	<p>Métodos Modernos de Caracterização Estrutural e Dinâmica de Proteínas.</p> <p>Profs. Drs. Fábio Cesar Gozzo (Coord.), Ljubica Tasic, Munir Salomão Skaf e Ricardo Aparício.</p> <p>Ementa:</p> <p>Clonagem, expressão, purificação e caracterização espectroscópica de proteínas em solução. Identificação de proteínas, seqüenciamento de peptídeos e caracterização de modificações por espectrometria de massas. Determinação de estruturas tridimensionais por espalhamento e difração de raio 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:</p> <p>Módulo I:</p> <ul style="list-style-type: none"> -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 – form of proteins in aqueous solution by circular dichroism, Chen, et al. (1974). Biochemistry 13: 3350-3359. <p>Módulo II:</p> <ul style="list-style-type: none"> -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>Módulo III:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Protein Crystallography (Molecular Biology Series). T. L. Blundell and L. Johson, 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. <p>Módulo IV:</p> <ul style="list-style-type: none"> -Molecular modeling: 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. 9:46 - Implications of Protein Flexibility for Drug Discovery, Taegue, S. J. (2003). Nature Reviews: Drug Discovery 2: 527-541. - Small Molecule Docking and Scoring, Muegger, I. and Rarey, M. (2001) Reviews in Computacional Chemistry 17, 1-60 (2001) - A reviw 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 	<p>Créditos: 04</p> <p>Vagas: Mínimo: 05 Máximo: 20</p>
--	---	---

	Predictions. Rost, B. and Sander, C. (1996) Annual Review of Bio physics and Biomolecular Structure.	
QP124 Turma "A" Terça e Quinta 14h às 16h Sala: E307 (IQ-10)	Introdução à Química Quântica e Espectroscopia Profs. Drs. Pedro Antônio Muniz Vazquez (Coord.) e René Alfonso Nome Silva 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: Introduction to Quantum Mechanics with Applications to 1) Chemistry by Linus Pauling and E. Bright Wilson Jr. Quantum Chemistry by Henry Eyring, John Walter, and George Kimball. 2) Physical Chemistry: A Molecular Approach by Donald A. McQuarrie and John D. Simon. 3) Molecular Spectra and Molecular Structure - Vol I by Gerhard Herzberg. 4) Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy by Daniel C. Harris and Michael D. Bertolucci. 5) Molecular Vibrations: The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra by Edgar Bright Wilson, J.C. Decius, and Paul C. Cross.	Créditos: 04 VAGAS: mínimo: 02 máximo: 30
QP125 Turma "A" Segunda e Sexta Segunda: 16h às 18h Sexta: 08h às 10h Sala: H103 (IQ08)	Introdução à Termodinâmica e à Cinética ATENÇÃO: Esta disciplina foi realocada para a sala E-307. Prof. Dr. Munir Salomão Skaf 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). Statistical Mechanics, D. A. McQuarrie (University Science Books, 2000).	Créditos: 04 VAGAS: mínimo: 03 máximo: 30
QP145 Turma "A" Segunda 14h às 16h Quarta 10h às 12h Sala: H102 (IQ07)	Periodicidade Profa. Dra. Ana Flávia Nogueira Ementa: Similaridades e dissimilaridades nos elementos do segundo e terceiro período; similaridades e dissimilaridades nos grupos dos elementos dos grupos de pos transição. 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	Créditos: 04 VAGAS: mínimo: 05 máximo: 20

	<p>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, Maxwell 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>QP212 Turma "A"</p> <p>Segunda e Sexta 10h às 12h</p> <p>Sala: E307 (IQ-10)</p>	<p>Métodos Eletroquímicos de Análise</p> <p>Profs. Drs. José Alberto Fracassi (coord.) e Lauro Tatsuo Kubota</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.), Chemical Sensors, Blackie, Glasgow, 1988. 2. A J. Bard and L.R. Faulkner, Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications, second edition, John Wiley & Sons, New York, 2001. 3. P.T. Kissinger and W.R. Henieman (Eds), Laboratory Techniques in Electroanalytical Chemistry, 2nd ed. Marcel Dekker, New York, 1996. 4. R.W. Murray, Chemically Modified Electrodes in A J. Bard (Ed) Electroanalytical Chemistry, vol. 13, Marcel Dekker, New York, 1984. 5. R.W. Murray, Molecular Design of Electrode Surfaces, vol 22, John Wiley & Sons, New York, 1992. 6. D.R. Crow, Principles and Applications of Electrochemistry, Third edition, Chapman & Hall, London, 1988. 7. K. Brainina and E. Neyman, Electroanalytical Stripping Methods, vol 126, John Wiley & Sons, New York, 1993. 8. K.B. Oldham and J.C. Myland, Fundamentals of Electrochemical Science, Academic Press, Inc. London, 1994. 9. D. Pletcher and F.C. Walsh, Industrial Electrochemistry, second edition, Blackie Academic & Professional, 1990. 10. J.A. Plambeck, Electroanalytical Chemistry: Basic Principles and Applications, John Wiley & Sons, New York, 1982. 11. P.L. Bailey, Analysis with Ion Selective Electrodes, 2nd Edition, Hayden & Sons, 1980. 12. Southampton Electrochemistry Group: Instrumental Methods in Electrochemistry, John Wiley & Sons, New York, 1985. 13. R.L. McCreery, Electroanalytical Chemistry, A.J. Bard (Ed) vol 17, Marcel Dekker, Inc., New York, 1991. 14. A. M. Bond, Modern Polarography Methods in Analytical Chemistry, Marcel Dekker, New York, 1980. 15. I.M. Kolthoff and J.J. Lingane, Polarography, 2nd Edition, Wiley-Interscience, New York, 1952. 16. J. O'M. Bockris and A. K. N. Reddy, Modern Electrochemistry 1A: Ionics, 2nd Edition, Plenum Press, New York, 1998. 17. J. O'M. Bockris, A. K. N. Reddy, and M. Gamboa-Aldeco, Modern Electrochemistry 2A: Eletrodics, 2nd Edition, Kluwer Academic and Plenum Publishers, New York, 2000. 18. M. E. Orazem and B. Tribollet, Electrochemical Impedance Spectroscopy, John Wiley & Sons, New Jersey, 2008.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 03 máximo: 12</p>

<p>QP222 Turma "A"</p> <p>Terças e Quintas 10h às 12h</p> <p>Sala: IQ-05</p>	<p>Métodos Físicos em Química Orgânica</p> <p><u>ATENÇÃO:</u> Esta disciplina foi realocada para a sala IQ05.</p> <p>Prof. Roberto Rittner Neto</p> <p>Ementa: Introdução, Espectroscopia de Infravermelho, Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear, Exercícios Combinados Envolvendo as duas Técnicas.</p> <p>Bibliografia: 1. Silverstein R.M., Webster F.X., Kiemle D.J., "Spectrometric Identification of Organic Compounds", Wiley, Hoboken, NJ, 7th Edn, 2005. Existem várias edições em português. 2. Hesse M., Meier H., Zeeh B., "Spectroscopy Methods in Organic Chemistry", G. Thieme, New York, 2th Edn., 2007. 3. Pavia, D.L., Lampman G.M., Kriz Jr. G.S., Vyvyan J.A., "Introduction to Spectroscopy", Brooks Cole, Philadelphia, 4th Edn, 2009. 4. Pavia, D.L., Lampman G.M., Kriz Jr. G.S., Vyvyan J.A., "Introdução à Espectroscopia", Cengage, São Paulo, 2010. 5. Simpson, J. H., "Organic Structure Determination Using 2-D NMR Spectroscopy", Academic, Burlington, MA, 2008.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: Mínimo: 05 Máximo:20</p>
<p>QP227 Turma "A"</p> <p>Segundas e Terças 14h às 16h</p> <p>Sala: E-312 (IQ11)</p>	<p>Fundamentos de Química Analítica</p> <p>Profs. Drs. Fabio Augusto (coord.), Ana Valéria Colnaghi S. Cantú, Anne Hélène Fostier e Solange Cadore.</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. 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>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 05 máximo: 20</p>

<p>QP232 Turma "A"</p> <p>Segunda-feira 08h às 10h</p> <p>Quarta-feira 16h às 18h</p> <p>Sala: E307 (IQ10)</p>	<p>Química Quântica II</p> <p>Pré-requisitos: QP031/QP124/QP125/AA100* *Autorização do Coordenador de Pós-Graduação</p> <p>Prof. Dr. Rogério Custodio.</p> <p>Ementa: Método SCF de Hartree-Fock para camada aberta. Cálculos moleculares. Métodos NDO. Cálculos "ab initio" gaussianos. Teorias de correlação: Interação de configuração, "coupled cluster" e métodos de perturbação, teoria do funcional de densidade e outros modelos teóricos.</p> <p>Bibliografia: A.Szabo e N. S. Ostlund, "Modern "Quantum Chemistry", McGraw-Hill, 1ª ed. Revisada (1982). Outras referências a serem apresentadas durante a evolução da disciplina.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: mínimo: 03 máximo: 20</p>
<p>QP268 Turma "A"</p> <p>Segunda e Quarta 19h às 21h</p> <p>Salas: Segunda: IQ04 Quarta: IQ06</p>	<p>Planejamento e Otimização de Experimentos</p> <p>ATENÇÃO: Às quartas, as aulas serão ministradas na sala IQ-06</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>QP313 Turma "A"</p> <p>Terça e Quarta 14h às 16h</p> <p>Sala: IQ-13</p>	<p>Métodos Espectroquímicos de Análise</p> <p>Profs. Drs. Adriana Vitorino Rossi (coord.), Marco Aurélio Zezzi Arruda, Ronei Jesus Poppi.</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, 5th edition, Saunders College Publishing, 1998 2. Spectrophotometry, luminescence and colour; Science and Compliance Analytical Spectroscopy Library, volume 6, Elsevier, Amsterdam, 1995</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: Mínimo: 05 Máximo: 25</p>

	<ol style="list-style-type: none"> 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 and 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 (editores), Inductively Coupled Plasmas in Analytical Atomic Spectrometry, 2nd ed., Wiley-VCH, Weinheim, 1992. 14. P. W. J. M. Boumans (editor), Inductively Coupled Plasma Emission Spectroscopy, Vols 1, 2, John Wiley, New York, 1987. 15. J. S. Becker, Inorganic Mass Spectrometry, Wiley, Weinheim, 2007. 	
<p>QP317 Turma "A"</p> <p>Terça e Quinta 08h às 10h</p> <p>Sala: E307 (IQ10)</p>	<p>Instrumentação e Automação em Química Analítica Profs. Drs. Ivo Milton Raimundo Junior (coord.), Celio Pasquini, Jarbas José Rodrigues Rohwedder.</p> <p>Ementa: Conceitos de mecanização, automação e robotização. Métodos discretos, contínuos e por injeção em fluxo. O papel do microcomputador. Eletrônica Analógica e Digital e suas aplicações em instrumentos de análise, uso do microcomputador no laboratório, técnicas de interfaceamento serial e paralelo.</p> <p>Bibliografia:</p> <p>1. M. Valente, G. S. M. D. Luque de Castro, Métodos de Injeção em Fluxo em Química Analítica, San Pablo, Córdoba, 1984.</p> <p>2. Kuzicka and E.H. Hansen. Flow Injection Analysis, Wiley-Interscience, 2nd ed., New York, 1988.</p> <p>3. B. Karlberg and G. E. Pacey, Flow Injection Analysis, Elsevier, Amsterdam 1989.</p> <p>4. P. Horowitz and W Hill, The Art of Eletrnicas, 7th ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1987.</p> <p>5. H. V. Malmstadt, C.G. Enke and S.R. Crouch, Eletronics and Instrumentation for Scientist, Benjamin/Cummings Co. INC., Menlo Park, CA, 1981.</p> <p>6. G. Currel, Instrumentation, John Wiley & Sons, Chichester, 1987</p> <p>7. D.J. Malcome-Lawes, Microcomputers, and Laboratory Instrumentation, Plenum, 2nd ed., London, 1988.</p> <p>8. D. Stevenson and K. Miller, Microprocessor Application, John Wiley & Sons, Chichester, 1987.</p> <p>9. R. Boylestad e L. Nashelsky, Dispositivos eletrônicos e Teoria de Circuitos, 5a. ed., Prentice-Hall do Brasil, Rio de Janeiro, 1992.</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: Mínimo: 04 Máximo: 16</p>

<p>QP322 Turma "A"</p> <p>Segunda e Quarta 16h às 18h</p> <p>Sala H102 (IQ07)</p>	<p>Sínteses Orgânicas</p> <p>Pré-requisitos: QP021/AA200* *Autorização do Coordenador</p> <p>Profs. Drs. Carlos Roque Duarte Correia (coord.), Cátia Cristina Capêlo Ornelas, Igor Dias Jurberg, Ronaldo Aloise Pilli, Simon Bernhard Cämmerer.</p> <p>Ementa: Estratégias para síntese orgânica. Análise retro-sintética. Discussão de sínteses selecionadas, com ênfase em diferentes propostas sintéticas para um mesmo substrato, enfocando estratégias, metodologias modernas e clássicas, mecanismos, controle estereoquímico. Nas sínteses, ênfase em metodologias modernas para formação de ligações carbono-carbono. Exemplificação de objetivos de uma síntese acadêmica e de uma síntese industrial.</p> <p>Bibliografia: 1. Artigos atuais em periódicos indexados correlacionados aos temas tratados; 2. Wyatt, P.; Warren, S. <i>Organic Synthesis: Strategy and Control</i>, John Wiley & Sons: Chippingham, 2007; 3. Warren, S.; Wyatt, P. <i>Organic Synthesis: The Disconnection Approach</i>, 2nd ed.; John Wiley & Sons: Chichester, 2008; 4. Smith, M. B. <i>Organic Synthesis</i>, 2nd ed.; McGraw-Hill: NY, 2002; 5. Carey, F.A.; Sundberg, R.J. <i>Advanced Organic Chemistry, Part B: Reaction and Synthesis</i>, 5th ed.; Plenum Publishers: NY, 2007; 6. Bruckner, R. <i>Advanced Organic Chemistry, Reaction Mechanisms</i>; Harcourt-Academic Press: San Diego, 2002; 7. Carruthers, W. e Coldham, I. <i>Modern Methods of Organic Synthesis</i>, 4th ed.; Cambridge University Press: Cambridge, 2004; 8. Hudlicky, T.; Reed, J.W. <i>The Way of Synthesis: Evolution of Design and Methods for Natural Products</i>, Wiley-VCH: Weinheim, 2007.</p> <p>Bibliografia suplementar: 1. Trost, B. M. e Fleming, I. <i>Comprehensive Organic Synthesis</i>, vol. 1-9, Pergamon Press, 1991; 2. Helmchen, G.; Hoffmann, R.; Mulzer, J.; Schaumann, E. <i>Houben-Weyl Methods in Organic Chemistry: Stereoselective Synthesis</i>, 4th ed.; Georg Thieme Verlag: NY, 1995; 3. Nicolaou, K.C.; Sorensen, E.J. <i>Classics in Total Synthesis</i>; VCH: Weinheim, 1996; 4. Nicolaou, K.C.; Snyder, S.A. <i>Classics in Total Synthesis II</i>; Wiley-VCH: Weinheim, 2003.</p>	<p>Créditos: 04 Vagas: Mínimo: 05 Máximo: 20</p>
<p>QP425 Turma "C"</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Orgânica III – "Spin-Dynamics"</p> <p>Prof responsável Anita J. Marsaioli</p> <p>Prof Participante: Prof Malcolm Levitt School of Chemistry, University of Southampton Inglaterra</p> <p>CURSO MINISTRADO INTERNAMENTE NO PERÍODO DE 15 A 17 DE MAIO DE 2013. SOMENTE OS ALUNOS QUE PARTICIPARAM DO CURSO PODERÃO SE MATRICULAR.</p> <p>Ementa: Conceitos de RMN, relaxação, hiperpolarização e polarização dinâmica nuclear, RMN rápida.</p> <p>Bibliografia:</p> <p>Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance, 2nd Edition. Malcolm H. Levitt. ISBN: 978- 0-470-51117-6. Wiley</p>	<p>Créditos: 01</p>

<p>QP427 Turma "C"</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Orgânica V – “Geoquímica Orgânica Teórico e Prático”</p> <p>Profa. Dra. Luzia Koike, com participação da Dra. Flavia Airoidi Aguayo.</p> <p>CURSO MINISTRADO INTERNAMENTE NO PRIMEIRO SEMESTRE DE 2013. SOMENTE OS ALUNOS QUE PARTICIPARAM DO CURSO PODERÃO SE MATRICULAR.</p> <p>EMENTA: Análises e tratamento de: solventes, reagentes e sílicas. Cromatografia de frações neutras de diferentes tipos de petróleo. Placa preparativa com sílica e nitrato de prata. Separação das frações ácidas e métodos novos de separação de ácidos com SPE (NH2) . Explicação e Análise em CG/Ms no equipamento, nos modos scan e sim. Trabalho com os óleos analisados. Teórico: Origem da Matéria Orgânica; Principais locais de origem do petróleo; Processo de formação dos óleos, Rocha geradora e Rocha Reservatório. Processos de Migração e Biodegradação e Geocromatografia. Biomarcadores significado e análises e cálculos dos parâmetros geoquímicos . Análise de correlação óleo-óleo; óleo-rocha; genese do óleo, ambiente deposicional.</p> <p>Bibliografia: JAFFÉ, R.; ALBRECHT, P.; OUDIN, J.L., 1988, Carboxylic acids as indicators of oil migration: II. Case of the Mahakam Delta, Indonesia, <i>Geochim. Cosmochim. Acta</i>, 52, 2599-2607. JAFFÉ, R.; GALLARDO, M.T., 1993, Application of carboxylic acid biomarkers as indicators of biodegradation and migration of crude oils from the Maracaibo Basin, Western Venezuela, <i>Org. Geochem.</i>, 20, 973-984. Perrin Douglas Dalzell-Purification em um Laboratório Químico (1980) second edition. Advanced Practical Organica Chemistry (1990). Kennet Peters and Michael Moldowan -vols 1 e 2 The Biomarkers Guide(2005). B.P.Tissot; DH Welte " Petroleum ForamtioN and Occurrence (1984) ASTM-American Society for Testing and Materials</p>	<p>Créditos: 02</p>
<p>QP433 Turma "C"</p> <p>Terça e Sexta 10h às 12h</p> <p>Salas:</p> <p>Terça H102 (IQ07)</p> <p>Sexta H103 (IQ08)</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química I – “Termodinâmica e Estatística: Fundamentos e Aplicações”.</p> <p>Pré-Requisitos: QP124/QP125/AA200* *Autorização do Coordenador.</p> <p>Prof. Dr. Leandro Martínez</p> <p>Ementa: Ensembles e a formulação estatísticas das 1ª e 2ª leis da termodinâmica. Mecânica estatística clássica e quântica. Gás ideal mono- e poliatômico. Funções partição translacional, rotacional, vibracional e eletrônica. Equilíbrio químico. Resde cristalina ideal. Flutuações. Simulações.</p> <p>Bibliografia: 1. D. A. McQuarrie, Statistical Thermodynamics, University Science Boody, 1973. 2. R. C. Tolman, The Principles of Statistical Mechanics, Oxford University Press, 1967. 3. F. Reif. Fundamentals of Statical and Thermal Physics (McGraw-Hill).</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: Mínimo: 01 Máximo 20</p>

<p>QP435 Turma "C"</p>	<p>Tópicos Especiais em Físico-Química IV – “Espectroscopia de Moléculas únicas e de Flutuação”</p> <p>CURSO MINISTRADO INTERNAMENTE ENTRE 13 DE MAIO E 01 DE JUNHO DE 2013. SOMENTE OS ALUNOS QUE PARTICIPARAM DO CURSO PODERÃO SE MATRICULAR.</p> <p>Profa. Dra. Teresa Dib Zambon Atvars e Prof. Dr. Pedro Francisco Aramendía (Univ. Buenos Aires – Argentina)</p> <p>Ementa:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Distribuição, traços temporais sob condições de equilíbrio, heterogeneidade (especial e temporal) 2. Técnicas: espectroscopia de moléculas únicas e técnicas de correlação 3. Princípios: análise de flutuações, análise de correlação, histogramas de amplitude e distribuição, intervalos de distribuição 4. Instrumentação: microscopia confocal e de campo largo; fotodiodos de avalanche, câmeras CCD, softwares de análise de dados 5. Estudo de casos: transferência de energia em polímeros e em single DNA strands; catálise enzimática, rotação e difusão em polímeros, agregação e associação. <p>Bibliografia:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ch. Zander, J. Enderlein, R.A. Keller (Eds.) Single Molecule Detection in Solution, Wiley VCH. Weinheim, 2002. 2. B. Valeur. Molecular Fluorescence. Wiley-VCH. Weineim. 2002. 	<p>Créditos: 02</p>
<p>QP443 Turma "C"</p> <p>Quarta e Sexta 14h às 16h</p> <p>Sala H103 (IQ08)</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica I – “Estrutura Eletrônica de Compostos de Coordenação”</p> <p>Prof. Dr. André Luiz Barboza Formiga</p> <p>Ementa:</p> <ul style="list-style-type: none"> *Teoria de grupo: produto direto, fórmula de redução e operador de projeção. *Estrutura eletrônica de íons metálicos. Termos espectroscópicos. Parâmetros de Racah. *Teoria do Campo Ligante. *Espectroscopia de campo ligante e regras de seleção. Análise de transições <i>d-d</i> e <i>f-f</i>. *Espectroscopia de transferência de carga e intervalência. *Teoria dos orbitais moleculares e modelagem molecular de compostos de coordenação: métodos semiempíricos e parametrização (PM3, PM6, RM1, ZINDO e Sparkle) para metais de transição; conjuntos de bases atômicas e potenciais de caroço (ECP); método Hartree-Fock para camada aberta e o problema dos termos espectroscópicos; Interação de Configuração (CI) e Métodos Multiconfiguracionais (MCSCF). *Métodos relativísticos para elementos dos períodos 5, 6 e 7 da Tabela Periódica. *Teoria do Funcional da Densidade (DFT). *Noções de cálculos usando os softwares MOPAC, ORCA e GAMESS. <p>Bibliografia:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) F.A.Cotton, <i>Chemical Applications of Group Theory</i>, 3rd ed, New York: Wiley, 1990. 2) A.B.P.Lever, <i>Inorganic electronic spectroscopy</i>, 2nd ed, Amsterdam: Elsevier, 1984. 3) F.Jensen, <i>Introduction to computational chemistry</i>, 2nd ed, Chichester: J. Wiley, 2006. 4) P.-O.Widmark, B.O.Roos (eds), <i>European summerschool in quantum chemistry</i>, 4th ed, vol. I-III, Lund: University of Lund Press, 	<p>Créditos: 04</p> <p>Vagas: Mínimo: 05 Máximo: 15</p>

	<p>2005. 5) Artigos selecionados.</p> <p>Critérios de Avaliação: Exercícios programados. A estes serão atribuídos conceitos de desempenho conforme regulamento da CPG/IQ.</p>	
<p>QP446 Turma “C”</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica IV – “Química e Espectroscopia de Elementos f”</p> <p>CURSO MINISTRADO INTERNAMENTE NO PERÍODO DE 04 DE MARÇO A 15 DO MESMO MÊS. SOMENTE OS ALUNOS QUE PARTICIPARAM DO CURSO PODERÃO SE MATRICULAR.</p> <p>Docentes: Prof. Dr. Fernando Aparecido Sigoli Profa. Dra. Ana de Bettencourt Dias – Universidade de Nevada – Reno – EUA</p> <p>Ementa: Introdução, história, ocorrência e separação de elementos f; química de coordenação e organometálicos, espectroscopia de íons lantanídeos.</p> <p>Bibliografia:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Blasse,G., Grabmaier, B. C. Luminescent materials. Berlin: Springer-Verlag, 1994. 2. Kitai, A. H. Solid state luminescence. Theory, materials and devices. London: Chapman &Hall, 1993. 3. Kitai, A. H., Luminescent materials and applications - Wiley Series in Materials for Electronic & Optoelectronic Applications 2008. 4. Lumb, M. D. Luminescence spectroscopy. London, Academic Press, 1978. 5. Ropp, R. C. Luminescence and the solid state. Amsterdam: Elsevier,1991. 6. Bunzli J. C., Lanthanides probes in life: medical and environmental science, Amsterdam; Elsevier, 1989. 7. Lever, A.B.P., Inorganic electronic spectroscopy, 2nd ed., Amsterdam: Elsevier, 1984. 8. Lakovicks J.R., Principles of fluorescence spectroscopy, 2nd ed., Kluwer academic, New York, 1999. 9. Moeller T., The chemistry of the lanthanides Oxford: Pergamon, 1973. 10. Cardin, D. J., Organometallic compounds of the lanthanides, actinides and early transition metals London: Champman and Hall, 1985 11. Huang, Chun-Hui, Rare earth coordination chemistry: fundamentals and applications. Singapore; Hoboken, N.J.: John Wiley, 2010. 12. Cotton S., Lanthanide and Actinides Chemistry, John Willey & Sons, 2006 13. Aspinall, H. C., Chemistry of the f-block elements, Gordon and Breach Science Publisher, 2001 14. Kaltosoyannis N., Scott, P., The f elements, Oxford Science Publications, 1999. <p>Critérios de Avaliação: Exercícios programados. A este serão atribuídos conceitos de desempenho conforme regulamento da CPG/IQ.</p>	<p>Créditos: 02</p>

<p>QP447 Turma "C"</p> <p>Sexta 10h às 12h</p> <p>Sala H102 (IQ07)</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica V – “Química Bionorgânica”</p> <p>Prof. Dr. Pedro Paulo Corbi</p> <p>Ementa: Conceitos e definições clássicas de compostos de coordenação e bioinorgânica. Aspectos fisiológicos e patológicos relacionados aos íons metálicos em sistemas biológicos. Elementos essenciais ao organismo humano (especificamente zinco, ferro e cobre) e intoxicações por metais pesados (chumbo, mercúrio e cádmio). Complexos metálicos de platina, ouro, vanádio e prata em medicina: planejamento, síntese e aplicações.</p> <p>Bibliografia:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. J. E. Huheey, E. A. Keiter, R. L. Keiter, Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity, 4a Ed., Harper Collins, 1993. 2. D. F. Shriver, P. W. Atkins, T. L. Overton, J. P. Rourke, M. T. Weller, F. A. Armstrong, Inorganic Chemistry, 4th Ed. Oxford University Press, Oxford, 2006. 3. H.-B. Kraatz, N. Metzler-Nolte (Eds.), Concepts and Models in Bioinorganic Chemistry. Wiley-VCH, Weinheim, 2006. 4. E. I. Ochiai, Bioinorganic Chemistry: an Introduction. Allyn and Bacon, Boston, 1977. 5. B. K. Keppler, Metal complexes in cancer chemotherapy. Weinheim. VCH Verlagsgesellschaft, 1993. 6. D. M. Taylor, D. R. Williams, Trace elements in medicine and chelation therapy. Cambridge: The Royal Society of Chemistry, 1995. 7. H. Sigel (Ed.) Metal Ions in Biological Systems - biological action of metal ions (vol.6). Marcel Dekker, New York, 1976. 8. R. Bakhtiar, E.I. Ochiai, Pharmacological applications of inorganic complexes. General Pharmacology, 32, 525-540, 1999. 9. N. Farrell, Biomedical uses and applications of inorganic chemistry. An overview. Coordination Chemistry Reviews, 232, 1-4, 2002. <p>Critérios de Avaliação:</p> <p>Seminários: temas a serem entregues aos alunos com no mínimo uma aula de antecedência. Nota de zero a dez</p> <p>Provas: uma prova escrita ao final do curso. Nota de zero a dez</p> <p>Média final: (nota da prova + média dos seminários) / 2</p>	<p>Créditos: 02</p> <p>Vagas: Mínima: 05 Máxima: 15</p>
<p>QP448 Turma "A"</p> <p>Segunda e Terça 10h às 12h</p> <p>Sala IQ13</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.lqes.iqm.unicamp.br)</p>	<p>Créditos: 04</p> <p>VAGAS: Mínimo: 05 Máximo: 20</p>
<p>QP648 Turma "C"</p>	<p>Tópicos Especiais em Química Inorgânica VI – “Multiconfigurational Quantum Chemistry: Theory and Application in Coordination Chemistry”</p> <p>CURSO MINISTRADO INTERNAMENTE NO PRIMEIRO SEMESTRE DE 2013. SOMENTE OS ALUNOS QUE PARTICIPARAM DO CURSO PODERÃO SE MATRICULAR.</p> <p>Profs. Drs. André Luiz Barboza Formiga (coordenador) e Kristine Pierloot (University of Leuven).</p>	<p>Créditos: 02</p> <p>Vagas: Mínimo: 02 Máximo: 07</p>

	<p>Ementa: Analysis of the quantum chemical description of H₂; Description of the complex electronic structure of the open dⁿ and fⁿ shell in coordination complexes; Statical versus dynamical correlation; Localized (valence bond) versus delocalized (molecular orbital) description of the wave function; Restricted versus unrestricted Hartree-Fock theory, spin-broken solutions and spin contamination; Comparative overview of the most important computational methods for the quantum chemical description of molecular electronic structure; Important multiconfigurational methods, CASSCF/CASPT2 and RASSCF/RASPT2 in transition metal chemistry; Illustrative examples of electronic structure calculations (including electronically excited states) in inorganic and bio-inorganic chemistry.</p> <p>Bibliografia</p> <p>B.O. Roos; in: <i>Advances in Chemical Physics</i>, vol. 67, p. 399,1987; B. O. Roos, K. Anderson, M. P. Fulscher, P, -A, MalmQVIST, L. Serrano-Andrs, K. Pierloot, M. Merchn; in <i>Advances in Chemical Physics</i>, vol. 93, p. 219, 1996. F. Jensen, Introduction to Computacional Chemistry, 2nd ed, Chichester: J. Wiley, 2006; P. -O Iwdmark, B. O. Roos (eds), European Summerschool in quantum chemistry, 4th ed, vol. I-III, Lund: University of Lund Press, 2005. Artigos selecionados.</p> <p>Crterios de Avaliao</p> <p>Exerccios programados. A estes sero atribudos conceitos de desempenho conforme regulamento da CPG/IQ.</p>	
<p>QP832 Turma "C"</p> <p>Segunda e Quarta 18h s 20h</p> <p>Sala H103 (IQ08)</p>	<p>Tpicos Especiais em Fsico-Qmica VIII – "Fsico-Qmica de Solues de Polmeros e Sulfatantes".</p> <p>Pr-requisitos: QP124/QP125/AA200* *Autorizao do coordenador.</p> <p>Profs. Dr.s Watson Loh (coord.) e Edvaldo Sabadini</p> <p>Ementa: Introduo a sulfatantes, Associao de surfactantes em soluo. Diagramas de fase de solues de sulfatantes. Formao e propriedades de micelas mistas. Teorias e propriedades de solues de polmeros. Associao em Soluo de Polmeros ou copolmeros-bloco. Equilbrio de fases. Misturas Polmero-sulfatante Tcnicas experimentais para investigao de solues de polmeros/sulfatantes.</p> <p>Bibliografia:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. D.F. Evans, H. Wenerstrom – The colloidal domain, VCH, 1994. 2. M.J. Rosen, Surfactants and interfacial phenomena, Wiley, 1989. 3. R.G. Laughlin, The aqueous phase behavior of surfactants, Academic Press, 1994. 4. E.F. Lucas, B.G. Monteiro, E. Monteiro, Caracterizao de Polmeros, e-papers, 2001. 5. I. Teraoka, Polymer Solutions, Wiley, 2002 	<p>Crditos:04</p> <p>VAGAS: Mnimo: 03 Mximo: 20</p>

INCIO DO SEMESTRE: 01 de Agosto de 2013
TRMINO DO SEMESTRE: 07 de Dezembro de 2013