

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

**DISCIPLINAS OFERECIDAS NO 2º SEMESTRE/2015**

**ATENÇÃO: A MATRÍCULA EM DISCIPLINAS PARA ALUNOS REGULARES SERÁ DE 01 A  
22 DE JULHO/2015**

<b>DISCIPLINAS DE DISSERTAÇÃO E TESE – Matrícula semestral</b>		
<b>AA001</b> Turma "A"	<b>Dissertação de Mestrado</b> (Matrícula Automática para alunos regulares)	
<b>AA002</b> Turma "A"	<b>Tese de Doutorado</b> (Matrícula Automática para alunos regulares)	
<b>DISCIPLINAS PARA O PROGRAMA DE ESTÁGIO DOCENTE (PED)</b> (Estas disciplinas não contam para a integralização curricular)		
<b>CD002/J</b>	<b>Programa de Estágio Docente</b> (Grupo B)	Créditos: 04
<b>CD003/J</b>	<b>Programa de Estágio Docente</b> (Grupo C)	Créditos: 02
<b>QP137/A</b> <b>SEMINÁRIOS</b>	<b>Mestrado</b> Frequentar, no mínimo 15 Seminários durante os três primeiros semestres do curso e ao início do terceiro semestre deverá se matricular na disciplina QP137/A para registro do comprimento desta exigência. O aluno poderá matricular-se assim que terminar os seminários dentro do período de matrícula.	Créditos: 02
<b>QP136/A</b> <b>SEMINÁRIOS</b>	<b>Doutorado</b> Frequentar, no mínimo 30 Seminários durante os seis primeiros semestres do curso e ao início do sexto semestre deverá se matricular na disciplina QP136/A para registro do comprimento desta exigência. O aluno poderá matricular-se assim que terminar os seminários dentro do período de matrícula.	Créditos: 04

<b>QP124</b> Turma "A"  <b>Terça e Quinta</b> 14h às 16h  <b>Sala: IQ-13</b>	<b>Introdução à Química Quântica e Espectroscopia</b>  Profs. Drs. Miguel San Miguel Barrera (Coordenador) e Diego Pereira dos Santos  <b>Ementa:</b> Ondas de matéria em sistemas simples. Partículas em campos de potencial variável, transições. Estrutura de átomos. A ligação química de moléculas simples. Moléculas diatômicas.  <b>Bibliografia:</b> 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.	<b>Créditos: 04</b>  <b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 02</b> <b>Máximo: 30</b>
--	---	--

<p><b>QP125</b> Turma "A"</p> <p><b>Segunda e Quarta</b> <b>16h às 18h</b></p> <p><b>Sala: H-102 (IQ07)</b></p>	<p><b>Introdução à Termodinâmica e à Cinética</b></p> <p>Prof. Dr. Mateus Borba Cardoso</p> <p><b>Ementa:</b> 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><b>Bibliografia:</b> Physical Chemistry, Ira N. Levine (6a ed., MacGraw Hill, 2008). Physical Chemistry, R. S. Berry, S. A. Rice &amp; J. Ross (2a ed., Oxford, 2000). Chemical Kinetics, K. J. Laidler (3a ed., Harper &amp; 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 &amp; K. Mikkelsen (Wiley-Interscience, 1997) Statistical Mechanics, D. A. McQuarrie (University Science Books, 2000).</p>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 03</b> <b>Máximo: 30</b></p>
<p><b>QP133</b> Turma "A"</p> <p><b>Terça</b> <b>16h às 18h</b></p> <p><b>Sala: IQ-13</b></p> <p><b>Quinta</b> <b>14h às 16h</b></p> <p><b>Sala F-10 (IQ10)</b></p>	<p><b>"Reologia de Sistemas Coloidais"</b></p> <p><b>Pré-Req.: QP124/QP125/AA200 (Autorização do Coordenador de Pós-Graduação)</b></p> <p>Prof. Dr. Edvaldo Sabadini</p> <p><b>Ementa:</b> 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 microestrutural. Aspectos instrumentais da reologia de sistemas coloidais: teoria e prática.</p> <p><b>Bibliografia:</b> 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 Structure and Rheology of Complex Fluids, Oxford University Press.</p>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 03</b> <b>Máximo: 15</b></p>
<p><b>QP144</b> Turma "A"</p> <p><b>Terça e Quinta</b> <b>14h às 16h</b></p> <p><b>Sala: H-102 (IQ07)</b></p>	<p><b>Fundamentos da Química Inorgânica Estrutural</b></p> <p>Prof. Dr. André Luiz Barboza Formiga</p> <p><b>Ementa:</b> Estrutura eletrônica dos átomos e propriedades periódicas. Teoria de grupo, simetria molecular e grupos pontuais. Modelos de ligação química em moléculas e sólidos: orbitais moleculares e introdução à teoria de bandas.</p> <p><b>Bibliografia Básica</b> N. N. Greenwood, A. Earnshaw, Chemistry of the elements, 2 ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1998. F. A. Cotton, Chemical Applications of Group Theory, 3 ed. New York : J. Willey &amp; Sons, 1990. S.L. Altmann, Band theory of solids: an introduction from the point of view of symmetry. Oxford : Oxford University Press, 1991. J. E. Huheey, E. A. Keiter, R. L. Keiter. Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity. 4th ed. New York : Harper Collins, 1993. G. Herzberg, Atomic spectra and atomic structure, Dover publications, 1944. <b>Bibliografia Complementar / Avançada</b> 1. Artigos selecionados.</p>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 04</b> <b>Máximo: 20</b></p>

<p><b>QP222</b> Turma "A"</p> <p><b>Segunda e Quarta</b> <b>10h às 12h</b></p> <p><b>Sala: H-103 (IQ08)</b></p>	<p><b>Métodos Físicos em Química Orgânica</b></p> <p>Prof. Dr. Roberto Rittner Neto</p> <p><b>Ementa:</b> Introdução, Espectroscopia de Infravermelho, Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear, Exercícios Combinados. Envolvendo as duas Técnicas.</p> <p><b>Bibliografia:</b> 1. Silverstein R.M., Webster F.X., Kiemle D.J., Bryce D.L., "Spectrometric Identification of Organic Compounds", Wiley, Hoboken, NJ, 8th Edn, 2014. 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., "Introdução à 1. Espectroscopia", Cengage, São Paulo, 2010.</p>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 20</b></p>
<p><b>QP227</b> Turma "A"</p> <p><b>Segunda e Quarta</b> <b>10h às 12h</b></p> <p><b>Sala: E-312 (IQ17)</b></p>	<p><b>Fundamentos de Química Analítica</b></p> <p>Profs. Drs. José Alberto Fracassi da Silva (Coordenador), Jarbas José Rodrigues Rohwedder, Alessandra Sussulini, Marcia Cristina Breitskreitz e Ivo Milton Raimundo Júnior.</p> <p><b>Ementa:</b> Equilíbrio químico. Íons em Solução. Teoria de titulações. Seleção de métodos analíticos. Estatística aplicada à Química Analítica.</p> <p><b>Bibliografia:</b> 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><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 20</b></p>
<p><b>QP268</b> Turma "A"</p> <p><b>Segunda e Quarta</b> <b>19h às 21h</b></p> <p><b>Sala: IQ-14</b></p>	<p><b>Planejamento e Otimização de Experimentos</b></p> <p>Prof. Dr. Roy Edward Bruns</p> <p><b>Ementa:</b> 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</p>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 100</b></p>

	<p>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><b>Bibliografia:</b> B de Barros Neto, I.S. Scarminio e R.E. Bruns, Editora Unicamp, 2001.</p>	
<p><b>QP313</b> <b>Turma "A"</b></p> <p><b>Quarta e Quinta</b> <b>14h às 16h</b></p> <p><b>Sala E-312 (IQ17)</b></p>	<p><b>Métodos Espectroquímicos de Análise</b></p> <p>Profs. Drs. Marco Aurélio Zezzi Arruda (Coordenador) e Ronei Jesus Poppi</p> <p><b>Ementa:</b> Métodos baseados na absorção, emissão e espalhamento da radiação eletromagnética. Sensores óticos.</p> <p><b>Bibliografia:</b> 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. 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. 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. 7. Welz, B. and Sperling, M. Atomic Absorption Spectrometry, 3rd ed., Wiley - VCH, Weinheim, 1999. 8. J. Dedina and D. L. Tsalev, Hydride Generation Atomic Absorption Spectrometry, Wiley, Chichester, 1995. 9. A. Montaser and D.W. Golightly (editores), Inductively Coupled Plasmas in Analytical Atomic Spectrometry, 2nd ed., Wiley - VCH, Weinheim, 1992. 10. P. W. J. M. Boumans (editor), Inductively Coupled Plasma Emission Spectroscopy, Vols 1, 2, John Wiley, New York, 1987. 11. J. S. Becker, Inorganic Mass Spectrometry, Wiley, Weinheim, 2007.</p>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 03</b> <b>Máximo: 25</b></p>
<p><b>QP314</b> <b>Turma "A"</b></p> <p><b>Terça</b> <b>16h às 18h</b></p> <p><b>Quinta</b> <b>08h às 10h</b></p> <p><b>Sala: F-10 (IQ10)</b></p>	<p><b>Métodos Analíticos Aplicados à Determinação de Traços</b></p> <p>Profas. Dras. Solange Cadore (Coordenadora) e Isabel Cristina Sales Fontes Jardim</p> <p><b>Ementa:</b> Aspectos gerais da determinação de baixas concentrações de espécies orgânicas e inorgânicas: pré-concentração, separação e especiação. Considerações básicas sobre o papel da matriz.</p> <p><b>Bibliografia:</b> 1. Welz, B. and Sperling, M., "Atomic Absorption Spectrometry", 3rd ed., Wiley-VCH, Weinheim, 1999. 2. Montaser, A. and Golightly, D.W., "Inductively Coupled Plasmas in Analytical Atomic Spectrometry", 2nd ed., VCH Publishers, Inc., New York, 1992. 3. Hill, J. S, "Inductively Coupled Plasma Spectrometry and its Applications", CRC Press, Boca Raton, 1999. 4. Tsalev, D. L. and Zaprianov, Z. K., "Atomic Absorption</p>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 15</b></p>

	<p>Spectrometry in Occupational and Environmental Health Practice”, Vol. 1 / 2 , CRC Press, Inc., Boca Raton, 1984.</p> <p>5. Skoog, D.A., Holler, F.J. and Nieman, T.A., “Princípios de Análise Instrumental”, 5a ed., Bookman, Porto Alegre, 2002.</p> <p>6. Marcus, R. K. and Broekaert, J. A. C. (Eds), “Glow Discharge Plasmas in Analytical Spectroscopy”, John Wiley &amp; Sons, Chichester, 2003.</p> <p>7. Ebdon, L. Evans, E.H., Fisher, A. and Hill, S.J., “An Introduction to Analytical Atomic Spectrometry”, John Wiley &amp; Sons, New York, 1998.</p> <p>8. Colins, C. H. Braga G. L.e Bonato, P. S., “Fundamentos de Cromatografia”. Ed. Unicamp. 2006.</p> <p>9. Meyer, V. R. "Practical High-Performance Liquid Chromatography", 4ed. John Wiley &amp; Sons, 2004</p> <p>Artigos recentemente publicados em periódicos da área, como: Anal. Bional. Chem., J. Anal. At. Spectrom., Anal. Chim. Acta, At.Spectrosc., Talanta., Spectrochim. Acta - Part B, Chromatographia A, J. Chromatogr. etc.</p>	
<p><b>QP322</b> <b>Turma "A"</b></p> <p><b>Quarta e Sexta</b> <b>16h às 18h</b></p> <p><b>Sala: H-103 (IQ08)</b></p>	<p><b>Síntese Orgânicas</b></p> <p><b>Pré-Req.: QP021/AA200 (Autorização do Coordenador de Pós-Graduação)</b></p> <p>Profs. Drs. Paulo César Muniz de Lacerda Miranda (Coordenador), Igor Dias Jurberg, Carlos Roque Duarte Correia e Simon Bernhard Cämmerer</p> <p><b>Ementa:</b> 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><b>Bibliografia:</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Artigos atuais em periódicos indexados correlacionados com temas da ementa.</li> <li>2. Wyatt, P. e Warren, S. “Organic Synthesis: Strategy and Control”, John Wiley &amp; Sons, 1a edição, Chippenham, Grã-Bretanha, 2007, 918 páginas, ISBN: 0-471-48940-5.</li> <li>3. Smith, M. B. “Organic Synthesis”, McGraw-Hill, 2a edição, Singapura, 2001, 1416 páginas, ISBN: 0-070-48242-5.</li> <li>4. Carey, F. A. e Sundberg, R. J. “Advanced Organic Chemistry, Part B: Reaction and Synthesis”, Springer Verlag, 5a edição, New York, EUA, 2008, 1322 páginas, ISBN: 0-387-68350-8.</li> <li>5. Carruthers, W. e Coldham, I., “Modern Methods of Organic Synthesis”, Cambridge University Press, 5a edição, Cambridge, Grã-Bretanha, 2004, 506 páginas, ISBN: 0-521-77830-5.</li> <li>6. Hudlicky, T. e Reed, J. W. “The Way of Synthesis: Evolution of Design and Methods for Natural Products”, Wiley-VCH, 1a edição, Weinheim, Alemanha, 2007, 1032 páginas, ISBN: 3-527-31444-7.</li> <li>7. Boger, D. L. “Modern Organic Synthesis: Lecture Notes”, TSRI Press, 1a edição, San Diego, EUA, 1999, 476 páginas, ASIN: B0006RAVMY.</li> <li>8. Nicolaou, K. C. e Sorensen, E. J., "Classics in Total Synthesis: Targets, Strategies, Methods", Wiley-VCH, 1996, 1a edição, Weinheim, Alemanha, 821 páginas, ISBN: 978-3-527-29231-8</li> <li>9. Nicolaou, K. C. e Snyder, S. A., "Classics in Total Synthesis II: More Targets, Strategies, Methods", Wiley-VCH, 2003, 1a edição, Weinheim, Alemanha, 658 páginas, ISBN: 978-3-527-30684-8</li> <li>10. Nicolaou, K. C. e Chen, J. S., "Classics in Total Synthesis III:</li> </ol>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 20</b></p>

	<p>Further Targets, Strategies, Methods", Wiley-VCH, 2011, 1a edição, Weinheim, Alemanha, 770 páginas, ISBN: 978-3-527-32957-1</p> <p>11. Carreira, E. M. e Kvaerno, L., "Classics in Stereoselective Synthesis", Wiley-VCH, 2009, 1a edição, Weinheim, Alemanha, 651 páginas, ISBN: 978-3-527-29966-9</p> <p><b>Bibliografia suplementar</b></p> <p>1. Trost, B. M. e Fleming, I. "Comprehensive Organic Synthesis", Nove volumes, Pergamon Press, 1a edição, 1991, ISBN: 0-080-35929-8.</p> <p>2. Helmchen, G.; Hoffmann, R.; Mulzer, J. e Schaumann, E. "Houben-Weyl Methods in Organic Chemistry: Stereoselective Synthesis", Georg Thieme Verlag, 1a edição, 1996, 840 páginas, ISBN: 3-131-02794-8.</p> <p>3. Paquette, L. A.; Crich, D.; Fuchs, P. L. e Molander, G. A. "Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis", Quatirze volumes, Wiley; 2a edição, 2009, ISBN: 978-0-470-01754-8.</p>	
<p><b>QP327</b> Turma "A"</p> <p><b>Segunda</b> 16h às 18h</p> <p><b>Quarta</b> 14h às 16h</p> <p><b>Sala H-103 (IQ08)</b></p>	<p><b>Interpretação e Atribuição de Espectros de RMN 1D e 2D</b></p> <p>Prof. Dr. Cláudio Francisco Tormena</p> <p><b>Ementa:</b> RMN de <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C e outros núcleos: deslocamento químico constantes de acoplamento, efeitos isotópicos, espectros de RMN 2D homo- e hetero-nucleares, interpretação de espectros.</p> <p><b>Bibliografia:</b></p> <p>1. J. H. Simpson, Organic Structure Determination using 2D NMR spectroscopy; Elsevier, 2008.</p> <p>2. T. D. W. Claridge, High-resolution NMR techniques in organic chemistry; 2nd edition; Elsevier, 2009.</p> <p>3. J. Keeler, Understanding NMR spectroscopy, 2nd edition; Wiley, 2010.</p>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 20</b></p>
<p><b>QP425</b> Turma "G"</p> <p><b>Sábado</b> 08h às 09h</p> <p><b>Sala F-10 (IQ10)</b></p>	<p><b>Tópicos Especiais em Química Orgânica III</b></p> <p><b>"Fluorine: A Small Atom with a Big Ego"</b></p> <p>Prof. Dr. Gerald B. Hammond, Universidade de Louisville, Kentucky, EUA</p> <p>Prof. Dr. Carlos Roque Duarte Correia (Responsável)</p> <p><b>DISCIPLINA MINISTRADA INTERNAMENTE PERÍODO DE: 16 a 20 de MARÇO DE 2015. SOMENTE OS ALUNOS QUE CURSARAM PODERÃO MATRICULAR-SE.</b></p> <p><b>Ementa:</b> Fluor na tabela periódica Propriedades físico-química de compostos organo-fluorados. O uso de fluor em Química Medicinal e na Indústria Farmacêutica Métodos clássicos de síntese de compostos organo-fluorados Métodos modernos de síntese de compostos organo-fluorados. Exemplos de aplicações recentes de compostos organo-fluorados.</p> <p>1) 'Organofluorine Chemistry' Kenji Uneyama, Blackwell Publishing, UK 2006.</p> <p>2) Modern Fluoroorganic Chemistry, Peer Kirsch, Wiley-VCH, 2004</p>	<p><b>Créditos: 01</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 25</b></p>

<p><b>QP434</b> Turma "G"</p> <p>Quinta 10h às 12h</p> <p>Sala: H-103 (IQ08)</p>	<p><b>Tópicos Especiais em Físico-Química II</b></p> <p><b>Pré-Req.:</b> QP124/QP125/AA200</p> <p><b>"Introdução aos fundamentos da Teoria do Funcional de Densidade"</b></p> <p>Prof. Dr. Ataulpa Albert Carmo Braga (Prof. Dr. Nelson Henrique Morgon - Responsável)</p> <p><b>Ementa:</b> Introdução aos fundamentos da Teoria do Funcional de Densidade (DFT). Resumo histórico desde as primeiras implementações até a atualidade. Comparação entre DFT e métodos baseados em função de onda. Comparação entre funcionais de diferentes classes: LDA, GGA, meta-GGA, híbridos e duplamente híbridos, além dos corrigidos de longo alcance. Entre os funcionais abordados destacamos: B3LYP, PBE, B3LYP-D3 e família M06. Quando os métodos baseados no DFT podem ser considerados a melhor opção (ou não)? TD-DFT, aplicações e limitações. Estudos de caso: catálise, reações em meios homogêneos e heterogêneos, sólidos, espectroscopia, sistemas biológicos e nanomateriais. O futuro da teoria do funcional de densidade.</p> <p><b>Bibliografia:</b> será fornecida durante a disciplina</p>	<p><b>Créditos: 02</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 04</b> <b>Máximo: 20</b></p>
<p><b>QP446</b> Turma "G"</p> <p>Quinta 10h às 12h</p> <p>Sala: H-102 (IQ07)</p>	<p><b>Tópicos Especiais em Química Inorgânica IV</b></p> <p><b>"Química Bioinorgânica"</b></p> <p>Prof. Dr. Pedro Paulo Corbi</p> <p><b>Ementa:</b> 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><b>Bibliografia</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. J. E. Huheey, E. A. Keiter, R. L. Keiter, <b>Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity</b>, 4a Ed., Harper Collins, 1993.</li> <li>2. D. F. Shriver, P. W. Atkins, T. L. Overton, J. P. Rourke, M. T. Weller, F. A. Armstrong, <b>Inorganic Chemistry</b>, 4th Ed. Oxford University Press, Oxford, 2006.</li> <li>3. H.-B. Kraatz, N. Metzler-Nolte (Eds.), <b>Concepts and Models in Bioinorganic Chemistry</b>. Wiley-VCH, Weinheim, 2006.</li> <li>4. B. K. Keppler, <b>Metal complexes in cancer chemotherapy</b>. Weinheim. VCH Verlagsgesellschaft, 1993.</li> <li>5. H. Sigel (Ed.) <b>Metal Ions in Biological Systems - biological action of metal ions (vol.6)</b>. Marcel Dekker, New York, 1976.</li> <li>6. S. J. Lippard, J. M. Berg. <b>Principles of Bioinorganic Chemistry</b>. Mill Valley: Univ. Science Books, 1994.</li> <li>7. R. Bakhtiar, E.I. Ochiai, <b>Pharmacological applications of inorganic complexes</b>. General Pharmacology, 32, 525-540, 1999.</li> <li>8. N. Farrell, <b>Biomedical uses and applications of inorganic chemistry. An overview</b>. Coordination Chemistry Reviews, 232, 1-4, 2002.</li> </ol> <p>□ CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO:</p> <p><b>Seminários:</b> temas a serem entregues aos alunos com no mínimo uma aula de antecedência. <b>Nota de zero a dez</b></p> <p><b>Provas:</b> uma prova escrita ao final do curso. <b>Nota de zero a dez</b></p> <p><b>Média final:</b> (nota da prova + média dos seminários) / 2</p>	<p><b>Créditos: 02</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 15</b></p>

<p><b>QP447</b> Turma "G"</p> <p>Quarta 14h às 16h</p> <p>Sala: H-102 (IQ07)</p>	<p><b>Tópicos Especiais em Química Inorgânica V</b></p> <p>"Nanomateriais e nanoestruturas na área de conversão e armazenamento de energia"</p> <p>Profa. Dra. Ana Flávia Nogueira</p> <p><b>Ementa:</b> Propriedades gerais dos nanomateriais e nanoestruturas. Revisão de física de semicondutores. Estrutura de bandas ou níveis de energia? Confinamento quântico. Fotofísica das nanopartículas em solução e filme. Teorias de transporte de portadores de carga. Nanomateriais e nanoestruturas em fotocatalise para degradação de compostos orgânicos e produção de <i>solar fuels</i> (redução de CO<sub>2</sub> e <i>water splitting</i>), conversão de energia solar em eletricidade (células solares orgânicas, TiO<sub>2</sub>/corante e perovskita), quantum dots inorgânicos em LEDs. Baterias de íons lítio e capacitores.</p> <p><b>Bibliografia:</b> Wilson, M., Kannangara, K., Raguse, B., Simmon, M. (2002) Nanotechnology: Basic Science and Emerging Technologies, Chapman and Hall/CRC Garcia-Martinez, J. (2010) Nanotechnology for the Energy Challenge, Wiley-VCH Somorjai, G.A., Frei, H., Park, J.Y. Advancing the frontiers in nanocatalysis, biointerfaces and renewable energy conversion by innovations of surface techniques, <i>J. Am. Chem. Soc.</i>, 2009, 131, 16589. Kamat, P.V. Meeting the clean energy demand. Nanostructure architectures for solar energy conversion, <i>J. Phys. Chem. C</i>, 2007, 111, 2834.</p>	<p><b>Créditos: 02</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 05</b> <b>Máximo: 20</b></p>
<p><b>QP448</b> Turma: "A"</p> <p>Segunda e Terça 10h às 12h</p> <p>Sala: H-102 (IQ07)</p>	<p><b>Química do Estado Sólido I</b></p> <p>Prof. Dr. Oswaldo Luiz Alves</p> <p><b>Ementa:</b> Simetria cristalina. Método de raios-x. Modelo de bandas (MB). Utilização do MB para explicação de propriedades de materiais. Modelo iônico imperfeito.</p> <p><b>Bibliografia:</b> Será fornecida pelo professor. Material de apoio do Laboratório de Química do Estado Sólido (<a href="http://www.lqes.iqm.unicamp.br">HTTP:// www.lqes.iqm.unicamp.br</a>)</p>	<p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>VAGAS:</b> <b>Mínimo: 04</b> <b>Máximo: 20</b></p>

**INÍCIO DO SEMESTRE: 03 de agosto de 2015**  
**TÉRMINO DO SEMESTRE: 05 de dezembro de 2015**