

**DISCIPLINAS OFERECIDAS NAS FÉRIAS DE INVERNO 2020**

A MATRÍCULA EM DISCIPLINAS DE FÉRIAS DE INVERNO PARA ALUNOS REGULARES SERÁ ENTRE OS DIAS **17 E 18 DE AGOSTO DE 2020**

Obs: A QP100 é recomendada aos alunos que pretendem participar do Programa de Estágio Docente (PED)

|                               |   |
|-------------------------------|---|
| <b>Disciplina:</b>            | <b>QP100 - Introdução à Docência no Ensino Superior de Química I</b>  |
| <b>Pré-Requisitos:</b>        | Não há pré-requisitos para essa disciplina.   |
| <b>Turma:</b> A               | <b>Prof. Dr. Gildo Giroto Junior</b>  |
| <b>Créditos:</b> 01           | <b>Vagas:</b> Mínimo: 05 e Máximo: 60   |
| <b>Sala:</b>                  | <b>Dias:</b> dias <b>25/08</b> das 8h às 12h e das 14 às 18 e <b>02/09</b> das 9 às 12 e das 14 às 18   |
| <b>Ementa:</b>                | <b>Preparação para Programa de Estágio Docência</b><br>EMENTA<br>Conceitos básicos da docência para o ensino superior. Planejamento e objetivos do ensino superior; estratégias de ensino e os diferentes métodos pedagógicos; o processo ensino/aprendizagem; processos de avaliação no nível superior; ambiente virtual de aprendizagem e tecnologias para o ensino; interações em sala de aula: o papel dos professores e dos alunos; perfil dos estudantes da UNICAMP.                            |
| <b>Conteúdo Programático:</b> | Introdução ao ensino superior.<br>Dificuldades de alunos e professores no Ensino Superior. Perfil dos estudantes e perfil dos professores<br>Metodologia e Didática / abordagens pedagógicas / limites e possibilidades.<br>O ciclo docente – escolha dos conteúdos, formulação de objetivos, planejamento, execução e avaliação, reflexão, elaboração de estratégias e instrumentação para o ensino.<br>Ambientes virtuais de aprendizagem e tecnologias no ensino.<br>Problemas no ensino superior. |
| <b>Bibliografia:</b>          | Bordenave, J.D.P. Pereira, A.M. Estratégias de ensino-aprendizagem. 21 ed. Rio de Janeiro-Vozes, 2000.<br>Lowman, J. Dominando As Técnicas De Ensino. Atlas, 2004.<br>Moreira, D.A. (Org) Didática Do Ensino Superior: Técnicas E Tendências. São Paulo: Pioneira, 1997.  |

**PÓS-GRADUAÇÃO IQ/UNICAMP - DISCIPLINAS OFERECIDAS NO 2º SEMESTRE DE 2020**

A MATRÍCULA EM DISCIPLINAS DO 2º SEMESTRE DE 2020 PARA ALUNOS REGULARES SERÁ DE **19 DE AGOSTO A 01 DE SETEMBRO DE 2020**

INÍCIO DO SEMESTRE: 16/09/2020 - TÉRMINO DO SEMESTRE: 19/01/2021

**DISCIPLINAS DE DISSERTAÇÃO E TESE – Matrícula semestral (automática, não deve ser inserida pelo aluno no SIGA)**

|                          |  |
|--------------------------|--|
| <b>Disciplina:</b> AA001 | <b>Dissertação de Mestrado</b>               |
| <b>Turma:</b> "A"        | (Matrícula Automática para alunos regulares) |
| <b>Disciplina:</b> AA002 | <b>Tese de Doutorado</b>                     |
| <b>Turma:</b> "A"        | (Matrícula Automática para alunos regulares) |

**DISCIPLINAS PARA O PROGRAMA DE ESTÁGIO DOCENTE (PED) - (automática para os selecionados, não deve ser inserida pelo aluno no SIGA)**

|                          |  |
|--------------------------|--|
| <b>Disciplina:</b> CD002 | <b>Programa de Estágio Docente - Grupo B</b> |
| <b>Turma:</b> "J"        | <b>Créditos:</b> 04                          |
| <b>Disciplina:</b> CD003 | <b>Programa de Estágio Docente - Grupo C</b> |
| <b>Turma:</b> "J"        | <b>Créditos:</b> 02                          |

Obs: AA001, AA002, CD002, CD003, não contam para a integralização curricular

**DISCIPLINAS DE SEMINÁRIO**

|                          |   |
|--------------------------|---|
| <b>Disciplina:</b> QP137 | <b>Seminários - Mestrado</b>  |
| <b>Turma:</b> "A"        | O aluno deve frequentar, <b>no mínimo 15 Seminários</b> durante os três primeiros semestres do curso e, <b>até o início do terceiro semestre do mestrado, matricular-se na disciplina</b> para registro do cumprimento desta exigência. |
| <b>Créditos:</b> 02      |   |
| <b>Disciplina:</b> QP136 | <b>Seminários - Doutorado</b>   |
| <b>Turma:</b> "A"        | O aluno deve frequentar, <b>no mínimo 30 Seminários</b> durante os seis primeiros semestres do curso e, <b>até o início do sexto semestre do doutorado, matricular-se na disciplina</b> para registro do cumprimento desta exigência.   |
| <b>Créditos:</b> 04      |   |

|                              |   |
|------------------------------|---|
| <b>Disciplina:</b>           | <b>QP124 - Introdução à Química Quântica e Espectroscopia</b>   |
| <b>Pré-Requisitos:</b>       | Não há pré-requisitos para essa disciplina.   |
| <b>Turma:</b> A              | <b>Profs. Drs. Rogerio Custodio e Diego Pereira dos Santos (coordenador)</b>  |
| <b>Créditos:</b> 04          | <b>Vagas:</b> Mínimo: 03 e Máximo: 30   |
| <b>Sala:</b>                 | <b>Dias:</b> quartas e sextas das 14 às 16h   |
| <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>Conteúdo Programático</b> | <b>1. Os princípios da teoria quântica</b><br>Evidências que conduziram ao surgimento da mecânica quântica<br>Postulados da Mecânica Quântica<br>I. Funções de onda<br>- Função de onda genérica estacionária e dependente do tempo.<br>- Densidade de probabilidade e probabilidade.<br>- Funções de onda normalizadas e não-normalizadas.<br>- Funções de onda bem comportadas: contínuas, unívocas e finitas.<br>II. Operadores<br>- Operador de momento linear.<br>- Criando operadores a partir de conceitos clássicos: Operador de energia potencial, cinética e hamiltoniano.<br>- Propriedades de operadores.<br>III. Teorema do Valor Médio<br>- Valores médios e probabilidade para valores discretos e contínuos.<br>IV. Equação de Schrödinger:<br>- Equação de Schrödinger dependente do tempo.<br>- Equação de Schrödinger independente do tempo.<br>- Solução da equação diferencial dependente apenas do tempo.<br>- A função de onda global dependente do tempo. |

|                              |   |
|------------------------------|---|
| <b>Conteúdo Programático</b> | <p><b>2. Resolução de alguns sistemas simples</b><br/> Movimento translacional<br/> - Partícula em uma caixa unidimensional (1D)<br/> - Partícula em uma caixa bidimensional (2D) e tridimensional (3D)<br/> Movimento vibracional<br/> - Oscilador harmônico<br/> - Princípio da correspondência<br/> Movimento rotacional<br/> - partícula no anel<br/> - rotor rígido</p> <p><b>3. O Átomo de Hidrogênio</b><br/> - Equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio:<br/> - Separação de variáveis: separação da eq. de Schrödinger em uma equação diferencial radial e a equação diferencial do rotor rígido.<br/> - Quantização da energia e unidades atômicas.</p> <p><b>4. Átomos Multieletrônicos</b><br/> - O hamiltoniano para o átomo de He e para sistemas multieletrônicos.<br/> - Resolvendo a eq. de Schrödinger para átomo sem repulsão elétron-elétron.<br/> - Estimando a energia do átomo de He com o produto de Hartree e com repulsão elétron-elétron: Integrais de Coulomb.<br/> - Postulado da Mecânica Quântica: o Spin Eletrônico.</p> <p><b>5. Moléculas</b><br/> - Aproximação Born-Oppenheimer<br/> - Teoria da ligação de valência<br/> - Teoria do orbital molecular<br/> - O método de Hartree e Hartree-Fock<br/> - As equações de Roothaan<br/> - Método de Huckel</p> <p><b>6. Espectroscopia Roto-Vibracional</b><br/> - Espectroscopia rotacional na região de microondas e noções sobre instrumentação.<br/> - Modelo do rotor rígido, espectros de moléculas diatômicas e regras de seleção.<br/> - Espectroscopia na região do infravermelho e noções sobre instrumentação.<br/> - Modelo do oscilador harmônico e anarmônico.<br/> - Análise de espectro roto-vibracional de moléculas diatômicas e regras de seleção.<br/> - Espectroscopia Raman e regras de seleção.</p> <p><b>7. Espectroscopia Eletrônica</b><br/> - Estrutura Eletrônica. Instrumentação de espectroscopia UV-vis. O átomo de hidrogênio.<br/> Espectros de emissão e absorção eletrônicas e regras de seleção. Noção sobre o efeito Stark e Zeeman.<br/> - Espectroscopia de absorção e emissão UV-visível. Noções sobre fotoquímica e fotofísica.</p> |
| <b>Bibliografia:</b>         | <p>PAULING L.; WILSON E. B., JR. Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry. New York: Dover Publications, 1985. ISBN 0-486-64871-0<br/> EYRING, H.; WALTER, J.; KIMBALL, G. Quantum Chemistry. John Wiley &amp; Sons Inc, 1966. ISBN 0-471-24981-5<br/> MCQUARRIE, D.A.; SIMON, J.D. Physical Chemistry: A Molecular Approach. University Science Books, 1997. ISBN 0-935-70299-6<br/> HERZBERG, G. Molecular Spectra and Molecular Structure. Vol. I. Krieger Pub Co, 1989. ISBN 0-894-64268-5<br/> SALA, O. Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho. Ed. Unesp, 1ª. Edição (1996).<br/> BARROW, G. N. Introduction to Molecular Spectroscopy. McGraw-Hill Education, (1962).<br/> HARRIS, D.C.; BERTOLUCCI, M.D. Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy. Dover Publications, 1989. ISBN 0-486-66144-5<br/> WILSON, E.B.; DECIUS, J.C.; CROSS, P.C. Molecular Vibrations: The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra. Dover Publications, 1980. ISBN 0-486-63941-3<br/> Outras referências da literatura.</p>   |

|                               |  |
|-------------------------------|--|
| <b>Disciplina:</b>            | <b>QP133 - Reologia de Sistemas Coloidais</b>  |
| <b>Pré-Requisitos:</b>        | (QP124) ou (QP125) ou (AA200)  |
| <b>Turma: A</b>               | <b>Prof. Dr. Edvaldo Sabadini</b>  |
| <b>Créditos: 04</b>           | <b>Vagas: Mínimo: 03 e Máximo: 15</b>  |
| <b>Sala:</b>                  | <b>Dias: segundas e quartas das 16 às 18h</b>  |
| <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.  |
| <b>Conteúdo Programático:</b> | Em uma parte da disciplina são apresentados alguns dos sistemas coloidais: poliméricos em solução, dispersões líquido/líquido e de partículas, agregados de surfactantes, e outros. Como a reologia é uma técnica que provê respostas macroscópicas, os resultados são discutidos a partir de informações microscópicas dos sistemas coloidais, investigado por técnicas complementares como: espalhamento de luz estático e dinâmico, e de nêutrons e potencial zeta. Em outra parte do curso são introduzidos fundamentos de reologia envolvendo os regimes linear e não-linear. Finalmente os vários tipos de colóides são estudados do ponto de vista reológico. |
| <b>Bibliografia:</b>          | Goodwin, J. W, and Hughes, R. W. Rheology for Chemistry RSC.<br>Macosko, C. W. Rheology - Principles, Measurements, and Applications Wiley- VCH.<br>Larson, R. G. The Structure and Rheology of Complex Fluids, Oxford University Press.   |

|                        |  |
|------------------------|--|
| <b>Disciplina:</b>     | <b>QP134 - Tecnologia de Fluidos Supercríticos</b>   |
| <b>Pré-Requisitos:</b> | (QP124) ou (QP125) ou (AA200)  |
| <b>Turma: A</b>        | <b>Prof. Dr. Paulo de Tarso Vieira e Rosa</b>  |
| <b>Créditos: 04</b>    | <b>Vagas: Mínimo: 01 e Máximo: 10</b>  |
| <b>Sala:</b>           | <b>Dias: quartas das 14 às 18h</b>   |
| <b>Ementa:</b>         | Conceitos básicos sobre fluidos supercríticos. Tecnologias supercríticas: Extração sólido-fluido supercrítico e líquido-fluido supercrítico, cromatografia preparativa, formação de partículas, impregnação, reações, esterilização. |

|                               |   |
|-------------------------------|---|
| <b>Conteúdo Programático:</b> | <p><b>1 Introdução</b></p> <p>1.1 Fluido Supercrítico</p> <p>1.2 Propriedades Físico-Química</p> <p>1.2.1 Densidade</p> <p>1.2.2 Coeficiente de difusão</p> <p>1.2.3 Condutividade térmica</p> <p>1.2.4 Capacidade calorífica</p> <p>1.2.5 Viscosidade</p> <p>1.2.6 Constante dielétrica</p> <p>1.2.7 Equilíbrio de fases</p> <p>1.2.7.1 Classificação de diagramas de fases de Scott e van Konynenburg</p> <p>1.2.7.2 Equações de estado cúbicas</p> <p>1.2.7.3 Determinação de equilíbrio de fases utilizando equações cúbicas de estado</p> <p>1.2.7.4 Determinações experimentais de equilíbrio de fases a altas pressões</p> <p><b>2 Extração Supercrítica</b></p> <p>2.1 Extração Sólido-Fluido</p> <p>2.1.1 Definição</p> <p>2.1.2 Características das matérias-primas</p> <p>2.1.3 Influência de parâmetros operacionais sobre a eficiência de extração</p> <p>2.1.4 Fracionamento do extrato</p> <p>2.1.4.1 Extração fracionada</p> <p>2.1.4.2 Separação fracionada</p> <p>2.1.5 Otimização das condições de extração</p> <p>2.1.6 Modelagem matemática de curvas de extração</p> <p>2.1.7 Estimativas de custo de produção de extrato</p> <p>2.2 Extração Fluido-Fluido</p> <p>2.2.1 Colunas empacotadas</p> <p>2.2.2 Modos de operação</p> <p>2.2.3 Fracionamento de matérias-primas líquidas</p> <p><b>3 Cromatografia Supercrítica</b></p> <p>3.1 Definições</p> <p>3.2 Tipos de cromatografias supercríticas</p> <p>3.3 Fases estacionárias utilizadas</p> <p>3.4 Tipos de isotermas de adsorção</p> <p>3.5 Determinação experimental das isotermas de adsorção</p> <p>3.6 Modos de operação</p> <p>3.6.1 Analítica</p> <p>3.6.2 Preparativa</p> <p>3.6.2.1 Uma coluna</p> <p>3.6.2.2 Leito móvel simulado</p> <p><b>4 Formação de Partículas em Meios Supercríticos</b></p> <p>4.1 Definições</p> <p>4.2 Curva de Saturação</p> <p>4.3 Métodos de Preparação de Partículas</p> <p>4.3.1 Expansão rápida de solução supercrítica</p> <p>4.3.1.1 RESS, RESOLV, RESA</p> <p>4.3.2 Antisolvente supercrítico</p> <p>4.3.2.1 GAS, PCA, SAS, SEDS, SFEE</p> <p>4.3.3 Partículas formadas a partir de soluções saturadas com gás</p> <p>4.3.3.1 PGSS, SAA</p> <p>4.3.4 Reações em meios supercríticos</p> <p><b>5 Reações em Meios Supercríticos</b></p> <p>5.1 Oxidação em água supercrítica</p> <p>5.2 Hidrólise com água superaquecida</p> <p>5.3 Produção de polímeros em meios supercríticos</p> <p>5.4 Catálise enzimática em meio supercrítico</p> <p>5.5 Produção de biodiesel com álcool supercrítico</p> <p><b>6 Outras Tecnologias Supercríticas</b></p> <p>6.1 Esterilização</p> <p>6.2 Impregnação</p> <p>6.3 Limpeza de superfícies</p> |
| <b>Bibliografia:</b>          | <p>Brunner, G., - Gas Extraction: Na Introduction to Fundamentals of Supercritical Fluids and the Application to Separation Processes (Topic in Physical Chemistry) – Springer, New York, 1994.</p> <p>DeSimone, J.M., Tumas, W. - Green chemistry using liquid and supercritical carbon dioxide - Oxford University Press, New York, 2003.</p> <p>York, P., Kompella, U.B., Shekunov, B.Y., - Supercritical fluid technology for drug product development, Marcel Dekker, New York, 2004.</p>  |

|   |  |
|---|--|
| <p><b>Disciplina:</b></p> <p><b>Pré-Requisitos:</b></p> <p><b>Turma: A</b></p> <p><b>Créditos: 04</b></p> <p><b>Sala:</b></p> | <p><b>QP148 - Química de Coordenação Avançada</b></p> <p>Não há pre-requisitos para essa disciplina.</p> <p><b>Prof. Dr. André Luiz Barboza Formiga</b></p> <p><b>Vagas:</b> Mínimo: 02 e Máximo: 20</p> <p><b>Dias:</b> segundas e quartas das 19 às 21h</p>  |
| <b>Ementa:</b>  | Teoria do Campo Ligante. Propriedades eletrônicas. Reatividade, cinética e mecanismos de reação em compostos de coordenação.   |
| <b>Conteúdo Programático:</b>   | <p>Estrutura eletrônica de íons metálicos e acoplamento spin-órbita. Termos espectroscópicos e Parâmetros de Racah.</p> <p>Teoria do Campo Ligante (Atomic Overlap Model).</p> <p>Espectroscopia de campo ligante e propriedades magnéticas de íons metálicos.</p> <p>Análise de transições d-d e f-f comparativamente a métodos espectroscópicos correlatos: EPR, Raman Ressonante e Mossbauer.</p> <p>Espectroscopia de transferência de carga e intervalência.</p> <p>Modelos cinéticos usados na interpretação de mecanismos de reações inorgânicas: substituição de ligantes, transferência de elétrons, processos fotoquímicos e reações com ligantes coordenados.</p> <p>Propriedades de compostos de coordenação usadas em aplicações como: conversão de energia, óptica não-linear, luminescência, agentes de contraste para MRI, catálise redox, eletroquímica, dentre outros.</p> |
| <b>Bibliografia:</b>  | <p>Bibliografia Básica</p> <p>G. Wilkinson, (eds.) Comprehensive coordination chemistry: the synthesis, reactions, properties &amp; applications of coordination compounds. Oxford: Pergamon, 1987.</p> <p>J.A. McCleverty. T. J. Meyer (eds.). Comprehensive coordination chemistry II: from biology to nanotechnology. Amsterdam: Elsevier Pergamon, 2004.</p> <p>E. I. Solomon, A. B. P. Lever (eds.). Inorganic Electronic Structure and Spectroscopy. New York: Wiley, 2006.</p> <p>F. A. Cotton, Chemical Applications of Group Theory, 3 ed. New York: J. Wiley &amp; Sons, 1990. S. A. B. P. Lever. Inorganic electronic spectroscopy. 2nd ed. Amsterdam: Elsevier, 1984.</p> <p>Bibliografia Complementar / Avançada</p> <p>Artigos selecionados pelo docente.</p>  |

|                               |   |
|-------------------------------|---|
| <b>Disciplina:</b>            | <b>QP156 - Nanomateriais e Nanoestruturas para Conversão e Armazenamento de Energia</b>   |
| <b>Pré-Requisitos:</b>        | Não há pré-requisitos para essa disciplina.   |
| <b>Turma: A</b>               | <b>Profa. Dra. Ana Flávia Nogueira</b>  |
| <b>Créditos: 02</b>           | <b>Vagas: Mínimo: 06 e Máximo: 40</b>   |
| <b>Sala:</b>                  | <b>Dias: sextas das 14 às 16h</b>   |
| <b>Ementa:</b>                | Conceitos básicos e propriedades dos nanomateriais e nanoestruturas. Nanopartículas metálicas e nanopartículas semicondutoras. Confinamento quântico. Importância da interface e superfície em nanomateriais. Fotofísica de nanopartículas. Aplicações na área de conversão e armazenamento de energia. Células solares baseadas em nanomateriais   |
| <b>Conteúdo Programático:</b> | Estrutura das nanopartículas Revisão de física de semicondutores.<br>Estrutura de bandas ou níveis de energia? Confinamento quântico. Nanopartículas 0D, 1D, 2D e 3D: propriedades e aspectos relevantes em síntese Plasmons de superfície em nanopartículas metálicas<br>O éxciton em semicondutores e nanopartículas Semicondutores orgânicos<br>Defeitos em nanopartículas e transporte eletrônico Carbono: os vários alótropos e suas propriedades<br>Nanomateriais e nanoestruturas em novas energias (i) fotocatalise para degradação de compostos orgânicos e produção de combustíveis solares (redução de CO <sub>2</sub> e reações de quebra da molécula de água) (ii) conversão de energia solar em eletricidade (células solares orgânicas, TiO <sub>2</sub> /corante e perovskita) (iii) baterias de íons lítio e capacitores (v) diodos emissores de luz |
| <b>Bibliografia:</b>          | SOGA, T. (ed), Nanostructured materials for solar energy conversion, Elsevier, 2007.<br>WILSON, M., KANNANGARA, K., RAGUSE, B., SIMMON, M. Nanotechnology: Basic Science and Emerging Technologies, Chapman and Hall/CRC, 2002.<br>GARCIA-MARTINEZ, J. Nanotechnology for the Energy Challenge, Wiley-VCH, 2010.<br>CAO, G., WANG, Y. Nanostructures and Nanomaterials: Synthesis, Properties, and Applications, Imperial College Press, 2011   |

|                               |   |
|-------------------------------|---|
| <b>Disciplina:</b>            | <b>QP216 - Técnicas Cromatográficas e Eletroforéticas</b>   |
| <b>Pré-Requisitos:</b>        | Não há pré-requisitos para essa disciplina.   |
| <b>Turma: A</b>               | <b>Profs. Drs. Carla Beatriz Grespan Bottoli (coord.), Dosil Pereira de Jesus, Fabio Augusto e Leandro Wang Hantao</b>  |
| <b>Créditos: 04</b>           | <b>Vagas: Mínimo: 01 e Máximo: 25</b>   |
| <b>Sala:</b>                  | <b>Dias: terças e quintas das 10 às 12h</b>   |
| <b>Ementa:</b>                | Fundamentos, cromatografia planar, cromatografia gasosa, cromatografia líquida, técnicas eletroforéticas.   |
| <b>Conteúdo Programático:</b> | Fundamentos de cromatografia: Histórico. Definições e termos técnicos. Classificações da cromatografia. Princípios teóricos. Teoria cinética. Análise qualitativa e quantitativa. Cromatografia planar: Definições e termos. Cromatografia em papel. Cromatografia em camada delgada. Técnicas de aplicação das amostras. Formas de desenvolvimento. Adsorventes. Fases móveis para cromatografia planar. Detecção e revelação. Cromatografia em camada delgada de alta eficiência. Cromatografia gasosa: Fundamentos da cromatografia gasosa. Instrumentação: gás de arraste, controladores, sistemas de injeção, colunas e detectores. Controle de temperatura da coluna, injetor e detector. Fases Estacionárias. Seleção das condições cromatográficas e otimização da análise. Derivatização. Cromatografia líquida: Fundamentos da cromatografia líquida. Cromatografia em coluna clássica. Instrumentação: reservatório de fase móvel, bombas de alta pressão, programadores de eluição, injetores, colunas e detectores. Fases móveis. Fases estacionárias. Modos de eluição. Cromatografia líquida capilar. Cromatografia de íons. Técnicas eletroforéticas: Histórico da eletroforese. Definição de eletroforese: aplicações de eletroforese em papel e em gel planar. Eletroforese capilar: conceitos e características. Efeito Joule. Fluxo eletrosmótico: conceitos e fatores que afetam. Fatores que contribuem para o alargamento das bandas. Parâmetros de separação. Parâmetros operacionais. Mobilidade efetiva. Instrumentação: modos de introdução da amostra, estratégias de pré-concentração, detectores. Modos de separação. |
| <b>Bibliografia:</b>          | 1. COLLINS, C. H.; BRAGA, G. L.; BONATO, P. S. (coordenadores), Fundamentos de Cromatografia, Editora da Unicamp, Campinas, 2006.<br>2. MILLER, J. M. Chromatography: Concepts and Contrasts, Wiley, New York, 1988.<br>3. POOLE, C. F.; POOLE, S. K. Chromatography Today, Elsevier, Amsterdam, 1991.<br>4. McNAIR, H.M.; MILLER, J.M. Basic Gas Chromatography, Wiley, New York, 1998<br>5. GROB, R.L. (editor) Modern Practice of Gas Chromatography, 3ª edição, Wiley, New York, 1995.<br>6. L.R. SNYDER, J. J. KIRKLAND, J. L. GLAJCH, Practical HPLC Method Development, 2ª edição, Wiley, New York, 1997.<br>7. MEYER, V. R. Practical Performance Liquid Chromatography, 4ª edição., Wiley, New York, 2004.<br>8. Landers, J. (editor) Capillary and Microchip Electrophoresis and Associated Microtechniques, 3ª edição, CRC Press, Boca Raton, 2008.<br>9. Baker, D.R. Capillary Electrophoresis, Wiley, New York, 1995   |

|                               |  |
|-------------------------------|--|
| <b>Disciplina:</b>            | <b>QP322 - Sínteses Orgânicas</b>  |
| <b>Pré-Requisitos:</b>        | (QP021) ou (AA200)   |
| <b>Turma: A</b>               | <b>Profa. Dra. Cátia Cristina Capêlo Ornelas Megiatto</b>  |
| <b>Créditos: 04</b>           | <b>Vagas: Mínimo: 04 e Máximo: 20</b>  |
| <b>Sala:</b>                  | <b>Dias: terças e quintas das 14 às 16h</b>  |
| <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.   |
| <b>Conteúdo Programático:</b> | Estratégias para síntese orgânica.<br>Análise retro-sintética.<br>Discussão de sínteses selecionadas, com ênfase em diferentes propostas sintéticas para um mesmo substrato.<br>Metodologias modernas para formação de ligações carbono-carbono e carbono-nitrogênio.<br>Estratégias sintéticas para obter moléculas orgânicas complexas usando metodologias modernas e clássicas.<br>Síntese e caracterização de moléculas orgânicas fotoativas.<br>Estratégias sintéticas para obter macromoléculas orgânicas complexas usando metodologias modernas e clássicas.<br>Exemplificação de objetivos de sínteses acadêmicas e de sínteses industriais. ☒   |
| <b>Bibliografia:</b>          | 1. Artigos atuais em periódicos indexados correlacionados com temas da ementa.<br>2. Wyatt, P. e Warren, S. "Organic Synthesis: Strategy and Control", John Wiley & Sons, 1ª edição, Chippenham, Grã-Bretanha, 2007, 918 páginas, ISBN: 0-471-48940-5.<br>3. Smith, M. B. "Organic Synthesis", McGraw-Hill, 2ª edição, Singapura, 2001, 1416 páginas, ISBN: 0-070-48242-5.<br>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.<br>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.<br>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.<br>7. Boger, D. L. "Modern Organic Synthesis: Lecture Notes", TSRI Press, 1ª edição, San Diego, EUA, 1999, 476 páginas, ASIN: B0006RAVMY.<br>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<br>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<br>10. Nicolaou, K. C. e Chen, J. S., "Classics in Total Synthesis III: Further Targets, Strategies, Methods", Wiley-VCH, 2011, 1ª edição, Weinheim, Alemanha, 770 páginas, ISBN: 978-3-527-32957-1<br>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 |

|                               |   |
|-------------------------------|---|
| <b>Disciplina:</b>            | <b>QP327 - Interpretação e Atribuição de Espectros de RMN 1D e 2D</b>   |
| <b>Pré-Requisitos:</b>        | Não há pré-requisitos para essa disciplina.   |
| <b>Turma: A</b>               | <b>Profs. Drs. Cláudio Francisco Tormena (coordenador) e Denize Cristina Favaro</b>   |
| <b>Créditos: 04</b>           | <b>Vagas: Mínimo: 05 e Máximo: 25</b>   |
| <b>Sala:</b>                  | <b>Dias: segundas e quartas das 18 às 20h</b>   |
| <b>Ementa:</b>                | RMN de 1H, 13C e outros núcleos: deslocamento químico, constantes de acoplamento, efeitos isotópicos, espectros de RMN 2D homo- e hetero-nucleares, interpretação de espectros.   |
| <b>Conteúdo Programático:</b> | <ul style="list-style-type: none"> <li>• Momento angular e momento magnético, núcleo magnético, interação campo magnético núcleo magnético, origem do sinal em RMN</li> <li>• Deslocamento químico em espectros de RMN 1H e 13C, interpretação dos deslocamentos químicos de alguns grupos funcionais em química orgânica.</li> <li>• Padrões dos sinais em espectros de RMN de 1H.</li> <li>• Sinais de 1ª e 2ª ordens; não equivalência química e magnética.</li> <li>• Acoplamentos com outros núcleos (15N, 19F e 31P).</li> <li>• Efeito isotópico (efeito vibracional) no deslocamento químico.</li> <li>• Efeito de troca em RMN.</li> <li>• Espectros de RMN 1D (1H, 13C, DEPT45, DEPT90 e DEPT135), alguns parâmetros de aquisição e de processamento. Interpretação de alguns espectros.</li> <li>• RMN 1D e 2D com supressão do sinal do solvente alguns parâmetros de aquisição e de processamento. Foco em peptídeos.</li> <li>• Espectros 2D homonuclear (COSY, NOESY, ROESY, TOCSY, INADEQUATE e ADEQUATE), parâmetros de aquisição e de processamento. Interpretação de alguns espectros.</li> <li>• Espectros 2D heteronuclear. Correlação a uma ligação (HSQC e HMQC) diferenças básicas entre as duas técnicas. Parâmetros de aquisição e de processamento. Interpretação de alguns espectros de HSQC e/ou HMQC.</li> <li>• Espectros de RMN 2D heteronuclear (HMBC). Parâmetros de aquisição e de processamento. Interpretação de alguns espectros.</li> <li>• Interpretação e atribuição das ressonâncias para um peptídeo com estrutura primária conhecida (1D e 2D – 15N-HSQC; 13C-HSQC; TOCSY; NOESY; HMBC).</li> <li>• Interpretação e atribuição da estrutura molecular para um conjunto de espectros de 1D e 2D para compostos com estrutura conhecida.</li> <li>• Interpretação e atribuição da estrutura molecular para um conjunto de espectros de 1D e 2D para amostras com estruturas desconhecidas.</li> </ul> |
| <b>Bibliografia:</b>          | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. J. H. Simpson, Organic Structure Determination using 2D NMR spectroscopy; Elsevier, 2008.</li> <li>2. T. D. W. Claridge, High-resolution NMR techniques in organic chemistry; 3rd edition; Elsevier, 2016.</li> <li>3. J. Keeler, Understanding NMR spectroscopy, 2nd edition; Wiley, 2010.</li> <li>4. K. Wüthrich, NMR of proteins and Nucleic acids; Wiley, 1991.</li> <li>5. G. S. Rule &amp; T. K. Hitchens, Fundamentals of Protein NMR Spectroscopy; Springer, 2006.</li> <li>6. J. Cavanagh, W. J. Fairbrother, A. G. Palmer III, M. Rance, N. J. Skelton, Protein NMR Spectroscopy: Principles and Practice; 2nd edition; Elsevier, 2007.</li> </ol>   |

|                               |   |
|-------------------------------|---|
| <b>Disciplina:</b>            | <b>QP414 - Tópicos Especiais em Química Analítica II</b>  |
| <b>Pré-Requisitos:</b>        | Não há pré-requisitos para essa disciplina. <b>OBS: DISCIPLINA NÃO ACEITARÁ ESTUDANTES ESPECIAIS</b>  |
| <b>Turma: Q</b>               | <b>Profa Dra. Márcia Cristina Breitkreitz</b>   |
| <b>Créditos: 04</b>           | <b>Vagas: Mínimo: 05 e Máximo: 20</b>   |
| <b>Sala:</b>                  | <b>Dias: terças e quartas das 14 às 16h</b>   |
| <b>Ementa:</b>                | "Estatística aplicada"<br>Conceitos básicos de Estatística descritiva e inferencial. Distribuições e testes estatísticos para comparações de médias, variâncias e detecção de amostras anômalas. Análise da Variância (ANOVA). Regressão linear. Introdução aos métodos multivariados de Planejamento Experimental e Análise de Componentes Principais.   |
| <b>Conteúdo Programático:</b> | Medidas de posição e dispersão: média, mediana, moda, desvio padrão, coeficiente de variação. Tipos de erros: grosseiros, sistemáticos e aleatórios. Detecção de amostras anômalas: Testes de Grubb's e Dixon. Distribuições estatísticas: Distribuição Normal, Distribuição Normal padronizada (z), Distribuição t-Student/e Distribuição F: propriedades, aplicação e uso de tabelas. Intervalos de confiança para um valor médio de uma variável aleatória empregando as distribuições z e t. Testes de hipótese utilizando as distribuições z, t e F para comparação de médias e variâncias. Análise da Variância (Analysis of Variance, ANOVA). Análise da regressão: Método dos Mínimos Quadrados, cálculo dos coeficientes de regressão e intervalos de confiança, coeficientes de correlação e determinação, avaliação dos resíduos e resíduos padronizados, normalidade e homoscedasticidade. Introdução à validação de métodos: as principais figuras de mérito: linearidade, precisão, exatidão, sensibilidade, limite de detecção, limite de quantificação e robustez. Introdução à Análise multivariada: Planejamento Experimental e Análise de Componentes Principais. A disciplina contará com parte teórica e exercícios em lousa e empregando o software Excel, para a resolução de problemas provenientes das áreas Química e Farmacêutica. |
| <b>Bibliografia:</b>          | <p>Miller, J.C. e Miller, J. N. Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry, 6th ed., Pearson, England, 2010.</p> <p>Bolton, S. Pharmaceutical Statistics: practical and clinical applications, 3rd ed., Marcel Dekker Inc., New York, 1997.</p> <p>Skooog D. A, West D. M, Holler FJ, Crouch S. R. Fundamentos de Química Analítica, Cengage Learning, São Paulo, 2006.</p> <p>Harris, D. C. Análise Química Quantitativa, LTC Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, 2008.</p> <p>Bruns, R., E., Scarminio, I., S., de Barros Neto, B. Como fazer experimentos: aplicações na ciência e na indústria, 4ª ed., Bookman, SP, 2010.</p> <p>Box, G. E. P., Hunter, J. S., Hunter, W. G. Statistics for Experimenters, John Wiley and Sons, New Jersey, 2005.</p> <p>Draper, N. e Smith. H. Applied Regression Analysis, 3rd ed., Wiley, EUA, 1998.</p>  |

|                               |   |
|-------------------------------|---|
| <b>Disciplina:</b>            | <b>QP423 - Tópicos Especiais em Química Orgânica I</b>  |
| <b>Pré-Requisitos:</b>        | Não há pré-requisitos para essa disciplina.   |
| <b>Turma: Q</b>               | <b>Prof. Dr. Carlos Henrique Inácio Ramos</b>   |
| <b>Créditos: 04</b>           | <b>Vagas: Mínimo: 02 e Máximo: 12</b>   |
| <b>Sala:</b>                  | <b>Dias: terças e sextas das 16 às 18h</b>  |
| <b>Ementa:</b>                | <b>"Propriedades moleculares e conformacionais de proteínas"</b>  |
| <b>Conteúdo Programático:</b> | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Aminoácidos e natureza polimérica</li> <li>2. Determinação do tamanho e comparação</li> <li>3. Biossíntese, mudanças pós-traducionais e aspectos evolutivos</li> <li>4. Interações físicas: forças não covalentes</li> <li>5. Conformação e aspectos hidrodinâmicos e espectroscópicos</li> <li>6. Dinâmica e flexibilidade</li> <li>7. Estabilidade e mecanismos de enovelamento</li> <li>8. Interações proteína-proteína e proteína-ligantes</li> <li>9. Engenharia de proteínas</li> <li>10. Enovelamento degradação e patologia</li> <li>11. O papel celular das proteínas à luz de descobertas recentes</li> </ol> |
| <b>Bibliografia:</b>          | <p>Nelson, D.; Cox, M.; Lehninger Principles of Biochemistry, 4th Ed., Freeman, 2005. [ou mais recente]</p> <p>Berg, J.; Tymoczko, J.; Stryer, L.; Biochemistry, 6th Ed., Freeman, 2006. [ou mais recente]</p> <p>Voet, D.; Voet, J.; Pratt, C.; Fundamentos de Bioquímica, Artmed, 2000. [ou mais recente]</p>   |

|                               |  |
|-------------------------------|--|
| <b>Disciplina:</b>            | <b>QP434 - Tópicos Especiais em Físico-Química II</b>  |
| <b>Pré-Requisitos:</b>        | (QP124) ou (QP125) ou (AA200)  |
| <b>Turma: Q</b>               | <b>Prof. Dr. Francisco Benedito Teixeira Pessine</b>   |
| <b>Créditos: 02</b>           | <b>Vagas: Mínimo: 10 e Máximo: 30</b>  |
| <b>Sala:</b>                  | <b>Dias: quartas das 19 às 21h</b>   |
| <b>Ementa:</b>                | " <b>Determinação de Potencial Zeta em Sistemas Nano-Estruturados</b> "<br>Ementa:<br>Introdução. Teoria do equilíbrio eletrocinético da dupla camada elétrica (DCE). Relações de reciprocidade. Superfície de cisalhamento. Medidas das propriedades eletrocinéticas. Limitações da teoria. Modelo padrão da DCE. Dinâmica na DCE. Efeitos eletrocinéticos. Soluções numéricas das equações relativas aos efeitos eletrocinéticos. Efeitos eletrocinéticos em campos alternados. Validade das equações eletrocinéticas.   |
| <b>Conteúdo Programático:</b> | 1. Introdução.<br>2. Teoria do equilíbrio eletrocinético da dupla camada elétrica (DCE). Eletro-osmose. Potencial "streaming". Eletroforese (eq. de Smoluchowski e Huckel). Fórmula de Henry.<br>3. Relações de reciprocidade.<br>4. Superfície de cisalhamento.<br>5. Medidas das propriedades eletrocinéticas.<br>Medidas do potencial e da corrente "streaming". Eletroforese.<br>6. Limitações da teoria.<br>7. Modelo padrão da DCE.<br>Equações relacionadas à eletrocinética. Condições de contorno.<br>8. Dinâmica na DCE.<br>Desenvolvimento da DCE em um condutor. DCE devida a íons em uma superfície dielétrica. Aplicação a um "problema" coloidal. Aproximação de linearização.<br>9. Efeitos eletrocinéticos.<br>Limitações da equação de Smoluchowski. Análise de Dukhin. Solução para uma partícula esférica isolada. Extensão a outros cálculos sobre eletrocinética.<br>10. Soluções numéricas das equações relativas aos efeitos eletrocinéticos.<br>11. Efeitos eletrocinéticos em campos alternados.<br>Comportamento em baixa frequência. Dispersão dielétrica (condutância em alta frequência). Eletroacústica.<br>12. Validade das equações eletrocinéticas |
| <b>Bibliografia:</b>          | Foundations of Colloidal Science (R.J. Hunter-Oxford University Press).<br>Artigos da literatura.  |

|                               |   |
|-------------------------------|---|
| <b>Disciplina:</b>            | <b>QP448 - Química do Estado Sólido I</b>   |
| <b>Pré-Requisitos:</b>        | Não há pre-requisitos para essa disciplina.   |
| <b>Turma: A</b>               | <b>Prof. Dr. Oswaldo Luiz Alves</b>   |
| <b>Créditos: 04</b>           | <b>Vagas: Mínimo: 02 e Máximo: 20</b>   |
| <b>Sala:</b>                  | <b>Dias: terças e quartas das 10 às 12h</b>   |
| <b>Ementa:</b>                | Grupos espaciais e simetria em sistemas cristalinos. Técnicas de caracterização. Teoria de bandas e sua utilização para explicação de propriedades de materiais.  |
| <b>Conteúdo Programático:</b> | 1. A importância da química do estado sólido e sua abrangência.<br>2. Sólidos cristalinos<br>2.1. Cella unitária e sistemas cristalinos. Simetria e grupos espaciais.<br>2.2. Redes de Bravais, planos cristalinos e índices de Miller,<br>2.3. Estruturas com empacotamento compacto e exemplos<br>2.4 Defeitos, óxidos não estequiométricos, solução sólidas<br>2.5 Difração de raios X: princípios e exemplos práticos<br>3. Ligação química em sólidos: Sólidos iônicos e energia de rede, sólidos covalentes e metais.<br>4. Teoria de bandas e propriedades eletrônicas<br>4.1 Metais<br>4.2 Isolantes<br>4.3 Semicondutores<br>4.4. Metais de transição e a importância da banda d.<br>5. Propriedades de materiais (elétrica, ótica, magnética)<br>6. Técnicas de caracterização aplicadas a sólidos. Exemplos. |
| <b>Bibliografia:</b>          | SANDS, D.E. Introduction to Crystallography, Revised Ed. New York, Dover Publications, INC, 1994. 192p. ISBN-10: 0486678393.<br>HAMMOND, C. The Basics of Crystallography, 3rd Ed., International Union of Crystallography- Oxford University Press, 2009. ISBN-10: 0199546452.<br>WEST, A.R. Solid State Chemistry and its Applications, 2nd Ed. Wiley, 2014, 582p. ISBN: 978-1-119-94294-8.<br>HARISON, V.A. Electronic Structure and Properties of Solids - The Physics of the Chemical New York, Bond, Dover Publications, INC, 1989. 608p. ISBN-10: 0486660214.<br>COX, P.A. The Electronic Structure and Chemistry of Solids, Oxford, Oxford Science Publications, 2005. 272p. ISBN-10: 0198552041<br>Bibliografia complementar a ser fornecida em aula.<br>Artigos selecionados.                                 |

|                               |  |
|-------------------------------|--|
| <b>Disciplina:</b>            | <b>QP819 - Tópicos Especiais em Química Analítica VII</b>  |
| <b>Pré-Requisitos:</b>        | Não há pre-requisitos para essa disciplina.  |
| <b>Turma: Q</b>               | <b>Profa. Dra. Susanne Rath</b>  |
| <b>Créditos: 02</b>           | <b>Vagas: Mínimo: 05 e Máximo: 30</b>  |
| <b>Sala:</b>                  | <b>Dias: sextas das 10 às 12 h</b>   |
| <b>Ementa:</b>                | " <b>Resíduos de fármacos veterinários em alimentos: toxicologia, legislação e validação de métodos</b> "<br>Ementa<br>Fundamentos em toxicologia de alimentos. Fármacos empregados na medicina veterinária. Resíduos de fármacos veterinários em alimentos, aspectos toxicológicos, estabelecimento de limites máximos de resíduos e legislação vigente. Avaliação de risco. Validação de métodos analíticos para determinação de resíduos de fármacos veterinários em alimentos.   |
| <b>Conteúdo Programático:</b> | Conceitos básicos de toxicologia; curvas dose-resposta; dose, exposição, fase toxicocinética, fase toxicodinâmica, fase clínica; avaliação toxicológica, ingestão diária aceitável (IDA), NOAEL, limites máximos de resíduos (LMR). Aspectos de legislação e estabelecimento de Limites Máximos de Resíduos. O papel do Codex Alimentarius, JECFA, ANVISA e MAPA na segurança do alimento. Fármacos empregados na medicina veterinária e problemas relacionados ao emprego destes. Monografias em farmacopeias. Métodos analíticos empregados na determinação de resíduos de fármacos com ênfase na cromatografia líquida associada a espectrometria de massas. Preparo de amostras. Validação de métodos analíticos para a determinação de resíduos de fármacos veterinários em alimentos. Tratamento de dados obtidos na validação de método para a determinação de resíduos de um fármaco veterinário em matriz biológica. Planilhas do Excel e apresentação dos parâmetros de validação. |

|                      |  |
|----------------------|--|
| <b>Bibliografia:</b> | <p>CASARETT and DOULL'S Toxicology. The Basic Science of Poisons. 7th Edition, McGraw-Hill Companies, New York, 2008.</p> <p>EUROPEAN COMMISSION REGULATION 2002/657/EC, 12 August, Official Journal of the European Communities, L 221, 2002.</p> <p>EUROPEAN COMMISSION REGULATION 2002/657/EC, 12 August, Official Journal of the European Communities, L 221, 2002.</p> <p>FDA/CDER/CVM, Guidance for Industry – Bioanalytical Method Validation, 2001. (<a href="http://fda.gov/cder/guidance/index.htm">http://fda.gov/cder/guidance/index.htm</a>).</p> <p>GUIA EURACHEM/CITAC. Determinando a Incerteza na Medição Analítica. 2a Edição. Versão Brasileira, 2002.</p> <p>INMETRO (Instituto Nacional de Metrologia, Normalização e Qualidade Industrial) DOQ-CGCRE-008. Orientação sobre validação de métodos de ensaios químicos. Rio de Janeiro: INMETRO, 2007.</p> <p>INMETRO, Orientações sobre Validação de Métodos e Ensaio Químicos, 2003.</p> <p>Manual de validação, verificação/confirmação de desempenho, estimativa da incerteza de medição e controle de qualidade intralaboratorial. MAPA, Lanagro, DEQ/CGAL 2014.</p> <p>MILLER JC, MILLER JN., Statistics for Analytical Chemistry. Ellis Horwood, 6a ed. 2010, Londres, Reino Unido.</p> <p>MINISTÉRIO DA AGRICULTURA, PECUÁRIA E ABASTECIMENTO - Guia para Validação de Métodos Analíticos e Controle de Qualidade Interna das Análises de Monitoramento do Plano Nacional de Resíduos e Contaminantes - PNCRC ANIMAL.</p> <p>OECD, 1996. Organization for Economic Co-operation and Development. Guidelines for testing of chemicals. Proposal for updating guideline 305 – Bioconcentration: Flow-through fish test. 1996.</p> <p>U.S. Food and Drug Administration (FDA). Guidance for Industry. General principles for evaluating the safety of compounds used in food-producing animals. July 2006.</p> <p>VICH GL 46. Studies to evaluate the metabolism and residue kinetics of veterinary drugs in food-producing animals: metabolism study to determine the quantity and identify the nature of residues. February, 2011.</p> <p>VICH GL 48(R). Studies to evaluate the metabolism and residue kinetics of veterinary drugs in food-producing animals: marker residue depletion studies to establish product withdrawal periods. February 2015.</p> |
|----------------------|--|

|                               |  |
|-------------------------------|--|
| <b>Disciplina:</b>            | <b>QP934 - Tópicos Especiais em Físico-Química X</b>   |
| <b>Pré-Requisitos:</b>        | Não há pré-requisitos para essa disciplina.  |
| <b>Turma: Q</b>               | <b>Prof. Dr. Leandro Martinez</b>  |
| <b>Créditos: 04</b>           | <b>Vagas: Mínimo: 05 e Máximo: 40</b>  |
| <b>Sala:</b>                  | <b>Dias: sextas das 08 às 12h</b>  |
| <b>Ementa:</b>                | <p><b>"Simulações de sistemas dinâmicos: da pandemia ao movimento molecular"</b></p> <p>Ementa:<br/>Nesta disciplina serão abordados conceitos avançados de programação e simulação, visando a implementação de algoritmos de simulação para resolução de equações diferenciais acopladas e simulações atomísticas. É necessário ter algum conhecimento prévio de programação e familiaridade com ambientes computacionais. O curso será baseado na implementação comparativa da cinética de uma evolução de uma epidemia a partir de modelos diferenciais ("macroscópicos"), com modelos de transmissão entre indivíduos ("atomísticos). A linguagem de programação de escolha é Julia. Detalhes da estrutura do código que será estudada ao longo do curso podem ser vistos em: <a href="http://github.com/m3g/CKP">http://github.com/m3g/CKP</a>.</p> |
| <b>Conteúdo Programático:</b> | <p>Solução numérica de equações diferenciais</p> <p>Estrutura de dados</p> <p>Listas ligadas</p> <p>Campos de força / funções de energia potencial</p> <p>Condições periódicas de contorno</p> <p>Método das células ligadas para simulações atomísticas</p> <p>Cinética de reações e parâmetros microscópicos.</p> <p>Ajustes não-lineares</p> <p>Otimização local e global de ajustes</p> <p>Produção de gráficos</p>  |
| <b>Bibliografia:</b>          | <p>Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications - Daan Frenkel, Berend Smit.</p> <p>The Art of Computer Programming, D. E. Knuth.</p>   |