

DISCIPLINAS OFERECIDAS NAS FÉRIAS DE INVERNO 2021

A MATRÍCULA EM DISCIPLINAS DE FÉRIAS DE INVERNO 2021 PARA ALUNOS REGULARES SERÁ NOS DIAS **12 e 13 de JULHO**

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

Disciplina:	QP100 - Introdução à Docência no Ensino Superior de Química I
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
Turma: A	Prof. Dr. Gildo Giroto Junior
Créditos: 1 (15h)	Vagas: Mínimo: 05 e Máximo: 60 Dias: dia 03/08 das 9 às 12h e das 14 às 18h e dia 05/08 das 8 às 12h e das 14 às 18h
Ementa:	Preparação para Programa de Estágio Docência EMENTA 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.
Conteúdo Programático:	Introdução ao ensino superior. Dificuldades de alunos e professores no Ensino Superior. Perfil dos estudantes e perfil dos professores Metodologia e Didática / abordagens pedagógicas / limites e possibilidades. O ciclo docente – escolha dos conteúdos, formulação de objetivos, planejamento, execução e avaliação, reflexão, elaboração de estratégias e instrumentação para o ensino. Ambientes virtuais de aprendizagem e tecnologias no ensino. Problemas no ensino superior.
Bibliografia:	Bordenave, J.D.P. Pereira, A.M. Estratégias de ensino-aprendizagem. 21 ed. Rio de Janeiro-Vozes, 2000. Lowman, J. Dominando As Técnicas De Ensino. Atlas, 2004. 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 2021

A MATRÍCULA EM DISCIPLINAS PARA ALUNOS REGULARES SERÁ DE **12 A 27 DE JULHO**

INÍCIO DO SEMESTRE: 09/08/2021 - TÉRMINO DO SEMESTRE: 14/12/2021

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

Disciplina: AA001	Dissertação de Mestrado
Turma "A"	(Matrícula Automática para alunos regulares)
Disciplina: AA002	Tese de Doutorado
Turma "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)

Disciplina: CD002	Programa de Estágio Docente - Grupo B
Turma "J"	Créditos: 04
Disciplina: CD003	Programa de Estágio Docente - Grupo C
Turma "J"	Créditos: 02

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

DISCIPLINAS DE SEMINÁRIO

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

PÓS-GRADUAÇÃO IQ/UNICAMP - DISCIPLINAS OFERECIDAS NO 2º SEMESTRE DE 2021

A MATRÍCULA EM DISCIPLINAS PARA ALUNOS REGULARES SERÁ DE **12 A 27 DE JULHO**

INÍCIO DO SEMESTRE: 09/08/2021 - TÉRMINO DO SEMESTRE: 14/12/2021

Disciplina:	QP124 - Introdução à Química Quântica e Espectroscopia
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
Turma: A	Profs. Drs. Diego Pereira dos Santos e René Alfonso Nome Silva (Coordenador)
Créditos: 4	Vagas: Mínimo: 03 e Máximo: 30 Dias: Terças e Quintas das 14 às 16h
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.
Conteúdo Programático:	1. Os princípios da teoria quântica Evidências que conduziram ao surgimento da mecânica quântica Postulados da Mecânica Quântica I. Funções de onda - Função de onda genérica estacionária e dependente do tempo. - Densidade de probabilidade e probabilidade. - Funções de onda normalizadas e não-normalizadas. - Funções de onda bem comportadas: contínuas, unívocas e finitas. II. Operadores - Operador de momento linear. - Criando operadores a partir de conceitos clássicos: Operador de energia potencial, cinética e hamiltoniano. - Propriedades de operadores. III. Teorema do Valor Médio - Valores médios e probabilidade para valores discretos e contínuos. IV. Equação de Schrödinger: - Equação de Schrödinger dependente do tempo. - Equação de Schrödinger independente do tempo. - Solução da equação diferencial dependente apenas do tempo. - A função de onda global dependente do tempo.


Conteúdo Programático:	<p>2. Resolução de alguns sistemas simples</p> <p>Movimento translacional</p> <ul style="list-style-type: none"> - Partícula em uma caixa unidimensional (1D) - Partícula em uma caixa bidimensional (2D) e tridimensional (3D) <p>Movimento vibracional</p> <ul style="list-style-type: none"> - Oscilador harmônico - Princípio da correspondência <p>Movimento rotacional</p> <ul style="list-style-type: none"> - partícula no anel - rotor rígido <p>3. O Átomo de Hidrogênio</p> <ul style="list-style-type: none"> - Equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio: - Separação de variáveis: separação da eq. de Schrödinger em uma equação diferencial radial e a equação diferencial do rotor rígido. - Quantização da energia e unidades atômicas. <p>4. Átomos Multieletrônicos</p> <ul style="list-style-type: none"> - O hamiltoniano para o átomo de He e para sistemas multieletrônicos. - Resolvendo a eq. de Schrödinger para átomo sem repulsão elétron-elétron. - Estimando a energia do átomo de He com o produto de Hartree e com repulsão elétron-elétron: Integrais de Coulomb. - Postulado da Mecânica Quântica: o Spin Eletrônico. <p>5. Moléculas</p> <ul style="list-style-type: none"> - Aproximação Born-Oppenheimer - Teoria da ligação de valência - Teoria do orbital molecular - O método de Hartree e Hartree-Fock - As equações de Roothaan - Método de Huckel <p>6. Espectroscopia Roto-Vibracional</p> <ul style="list-style-type: none"> - Espectroscopia rotacional na região de microondas e noções sobre instrumentação. - Modelo do rotor rígido, espectros de moléculas diatômicas e regras de seleção. - Espectroscopia na região do infravermelho e noções sobre instrumentação. - Modelo do oscilador harmônico e anarmônico. - Análise de espectro roto-vibracional de moléculas diatômicas e regras de seleção. - Espectroscopia Raman e regras de seleção. <p>7. Espectroscopia Eletrônica</p> <ul style="list-style-type: none"> - Estrutura Eletrônica. Instrumentação de espectroscopia UV-vis. O átomo de hidrogênio. - Espectros de emissão e absorção eletrônicas e regras de seleção. Noção sobre o efeito Stark e Zeeman. - Espectroscopia de absorção e emissão UV-visível. Noções sobre fotoquímica e fotofísica.
-------------------------------	---

Bibliografia:	<p>Bibliografia Básica</p> <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</p> <p>EYRING, H.; WALTER, J.; KIMBALL, G. Quantum Chemistry. John Wiley & Sons Inc, 1966. ISBN 0-471-24981-5</p> <p>MCQUARRIE, D.A.; SIMON, J.D. Physical Chemistry: A Molecular Approach. University Science Books, 1997. ISBN 0-935-70299-6</p> <p>HERZBERG, G. Molecular Spectra and Molecular Structure. Vol. I. Krieger Pub Co, 1989. ISBN 0-894-64268-5</p> <p>SALA, O. Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho. Ed. Unesp, 1ª. Edição (1996).</p> <p>BARROW, G. N. Introduction to Molecular Spectroscopy. McGraw-Hill Education, (1962).</p> <p>HARRIS, D.C.; BERTOLUCCI, M.D. Symmetry and Spectroscopy: An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy. Dover Publications, 1989. ISBN 0-486-66144-5</p> <p>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</p> <p>Bibliografia Complementar / Avançada</p> <p>Outras referências da literatura</p>
----------------------	---

Disciplina: Pré-Requisitos: Turma: A Créditos: 04	<p>QP129 - Físico-Química de Soluções Poliméricas e Surfactantes</p> <p>(QP124) ou (QP125) ou (AA200)</p> <p>Prof. Drs. Edvaldo Sabadini (coordenador) e Watson Loh</p> <p>Vagas: Mínimo: 05 e Máximo: 15</p> <p>Dias: Segundas e Quartas das 16 às 18h</p>
Ementa:	Introdução a surfactantes. Associação de surfactantes em solução. Diagramas de fase de soluções de surfactantes. Formação e propriedades de micelas mistas. Teorias e propriedades de soluções de polímeros. Associação em Solução de Polímeros ou copolímeros-bloco. Equilíbrio de fases. Misturas Polímero-surfatante. Técnicas experimentais para investigação de soluções de polímeros/surfactantes.
Conteúdo Programático:	Introdução a Surfactantes Associação de Surfactantes, Sistemas Liotrópicos, Diagramas de Fase Misturas Surfactantes-Polímero Teorias de Soluções de Polímeros Técnicas experimentais para estudos de sistemas com surfactantes e polímeros: calorimetria, técnicas de espalhamento de radiação, reologia.
Bibliografia:	<p>Bibliografia Básica</p> <ul style="list-style-type: none"> - The Colloidal Domain, D. Fennel Evans and H. Wennestrsm, Wiley-VCH, 2nd ed., 1999. - Surfactants and Polymers in Aqueous Solutions, B. Jonsson, B. Lindman, K. Holmberg, B. Kronberg, Wiley, 1998. - The Aqueous Phase Behavior of Surfactants, R.G. Laughlin, Academic Press, 1994. - Polymer Solutions, I. Teraoka, Wiley-Interscience, 2002. - Principles of Polymer Chemistry, P. J. Flory, Cornell University Press, 1953. - Rheology for Chemistry, J. W. Goodwin, R. W. Hugues, Royal Society of Chemistry, 2000. <p>Bibliografia Complementar / Avançada</p>

Disciplina: Pré-Requisitos: Turma: A Créditos: 04	<p>QP157 - Periodicidade e Ligações Químicas</p> <p>Não há pré-requisitos para essa disciplina.</p> <p>Prof. Dr. Jackson Dirceu Megiatto Jr.</p> <p>Vagas: Mínimo: 03 e Máximo: 30</p> <p>Dias: Quartas das 14 às 16h e Sextas das 09 às 11h</p>
Ementa:	Similaridades e dissimilaridades nos elementos químicos. Propriedades periódicas. Estudo da formação dos compostos e formação de ligações múltiplas.
Conteúdo Programático:	<ol style="list-style-type: none"> 1. História e tipos de Tabela Periódica 2. Estrutura atômica e orbitais (mecânica clássica) Mecânica quântica e Equação de Schrödinger. Configuração eletrônica. Orbitais. 3. Propriedades periódicas: raio atômico, afinidade eletrônica, energia dos orbitais, carga nuclear efetiva. 4. Eletronegatividade: teorias de Linus Pauling, Mulliken-Jaffé, Sanderson 5. Efeito relativístico e par inerte 6. Relação Diagonal 7. Ligação Química: orbitais d em ligações químicas no bloco p; orbitais d em ligações múltiplas em compostos do bloco d; ligações múltiplas em derivados mais pesados do bloco p; Ligação quádrupla no C2 8. Ligações iônica e metálica 9. Metais de transição, grupo Zn e bloco f: propriedades e estrutura. 10. Similaridades e Dissimilaridades do Grupo 13, 14 e 15: propriedades e estrutura.

Bibliografia:	HUHEEY, J.E., KEITER, E.A., KEITER, R.L. – Principles of Structure and Reactivity, 4.ed., Harper Collins College Publishers, 1993. GREENWOOD, N.N., EARNSHAW, A. – Chemistry of the Elements, Maxwell Macmillan International Editions, 2ed., 1997. COTTON, F.A., WILKINSON, G., MURILO, C.A., BOCHMANN, M. – Advanced Inorganic Chemistry, Wiley-Interscience, 6ed., 1999. FRENKING, G.; SHAIK, S. (ed.). The chemical bond: chemical bonding across the periodic table. Weinheim: Wiley-VCH, 2014. Bibliografia Complementar / Avançada. Artigos selecionados
----------------------	---

Disciplina: Pré-Requisitos: Turma: A Créditos: 04	QP158 - Teoria de Grupo Aplicada a Química Inorgânica Não há pré-requisitos para essa disciplina. Prof. Dr. Oswaldo Luiz Alves Vagas: Mínimo: 05 e Máximo: 15 Dias: Segundas e Terças das 10 às 12h	 Disciplina não será oferecida
Ementa:	Teoria de grupo, simetria molecular e grupos pontuais. Modelos de ligação química em moléculas e sólidos: orbitais moleculares, campo ligante e introdução à teoria de bandas.	
Conteúdo Programático:	Definições e teoremas de teoria de grupo; Representação matricial de operações de simetria e de grupos; Simetria molecular e grupos pontuais; Combinação linear adaptada por simetria; Teoria dos orbitais moleculares aplicada a compostos inorgânicos e organometálicos; Teoria do Campo Ligante Vibrações moleculares Extensão da teoria de orbitais moleculares aplicada a sólidos – introdução à teoria de bandas.	
Bibliografia:	Bibliografia Básica COTTON, F. A. Chemical Applications of Group Theory, 3 ed. New York: J. Wiley & Sons, 1990. MIESSLER, G. L., TARR, D. A. Inorganic Chemistry. 4th ed., Harlow: Pearson, 2011. ALTMANN, S. L. Band theory of solids: an introduction from the point of view of symmetry. Oxford: Oxford University Press, 1991. HUHEEY, J. E.; KEITER, E. A.; KEITER, R. L. Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity. 4th ed. New York: Harper Collins, 1993. LEVER, A. B. P., Inorganic electronic spectroscopy, 2nd ed., Amsterdam: Elsevier, 1984. Bibliografia Complementar / Avançada. Artigos selecionados.	

Disciplina: Pré-Requisitos: Turma: A Créditos: 04	QP216 - Técnicas Cromatográficas e Eletroforéticas Não há pré-requisitos para essa disciplina. Profs. Drs. Fabio Augusto (coordenador), Alessandra Sussulini e Ana Valéria Colnaghi Simonato Vagas: Mínimo: 01 e Máximo: 25 Dias: Segundas e Quartas das 10 às 12h
Ementa:	Fundamentos, cromatografia planar, cromatografia gasosa, cromatografia líquida, técnicas eletroforéticas.
Conteúdo Programático:	Fundamentos de cromatografia: Histórico. Definições e termos técnicos. Classificações da cromatografia. Princípios teóricos. Teoria cinética. Análise qualitativa e quantitativa. Cromatografia planar: Definições e termos. Técnicas de aplicação das amostras. Formas de desenvolvimento. Adsorventes. Fases móveis. Detecção e revelação. Cromatografia em camada delgada de alta eficiência e ultra-cromatografia em camada delgada. Cromatografia gasosa: Fundamentos da cromatografia gasosa. Instrumentação: gás de arraste, sistemas de injeção, colunas e detectores. Interfaces para separações multidimensionais. Modelos de solvatação e fases estacionárias. Métodos hifenados. Derivação de compostos polares. Aspectos básicos de preparo de amostras. 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. Amostras iônicas. Métodos hifenados. Cromatografia líquida capilar. Cromatografia de fluido super crítico 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.
Bibliografia:	COLLINS, C. H.; BRAGA, G. L.; BONATO, P. S. (coordenadores), Fundamentos de Cromatografia, Editora da Unicamp, Campinas, 2006. MILLER, J. M. Chromatography: Concepts and Contrasts, Wiley, New York, 1988. POOLE, C. F. The Essence of Chromatography, Elsevier, Amsterdam, 2002. MCNAIR, H.M.; MILLER, J.M. Basic Gas Chromatography, Wiley, New York, 1998 GROB, R.L. (editor) Modern Practice of Gas Chromatography, 4ª edição, Wiley, New York, 2008. L.R. SNYDER, J. J. KIRKLAND, J. L. GLAJCH, Practical HPLC Method Development, 2ª edição, Wiley, New York, 1997. MEYER, V. R. Practical Performance Liquid Chromatography, 4ª edição., Wiley, New York, 2004. Landers, J. (editor) Capillary and Microchip Electrophoresis and Associated Microtechniques, 3ª edição, CRC Press, Boca Raton, 2008. Baker, D.R. Capillary Electrophoresis, Wiley, New York, 1995. Ramautar, R. Capillary Electrophoresis–Mass Spectrometry for Metabolomics (New Developments in Mass Spectrometry, Volume 6) 1st edition, Royal Society of Chemistry, The Netherlands, 2018.

Disciplina: Pré-Requisitos: Turma: A Créditos: 04	QP322 - Sínteses Orgânicas (QP021) ou (AA200) Prof. Dr. Luiz Carlos Dias Vagas: Mínimo: 02 e Máximo: 30 Dias: Segundas e Quartas-feiras das 14 às 16h
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.
Conteúdo Programático:	Estratégias para síntese orgânica. Análise retro-sintética. Discussão de sínteses selecionadas, com ênfase em diferentes propostas sintéticas para um mesmo substrato. Metodologias modernas para formação de ligações carbono-carbono e carbono-nitrogênio. Estratégias sintéticas para obter moléculas orgânicas complexas usando metodologias modernas e clássicas. Síntese e caracterização de moléculas orgânicas fotoativas. Estratégias sintéticas para obter macromoléculas orgânicas complexas usando metodologias modernas e clássicas. Exemplificação de objetivos de sínteses acadêmicas e de sínteses industriais.

Bibliografia:	<ol style="list-style-type: none"> 1. Artigos atuais em periódicos indexados correlacionados com temas da ementa. 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. 3. Smith, M. B. "Organic Synthesis", McGraw-Hill, 2ª edição, Singapura, 2001, 1416 páginas, ISBN: 0-070-48242-5. 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. 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. 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. 7. Boger, D. L. "Modern Organic Synthesis: Lecture Notes", TSRI Press, 1ª edição, San Diego, EUA, 1999, 476 páginas, ASIN: B0006RAVMY. 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 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 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 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
----------------------	--


Disciplina: Pré-Requisitos: Turma: A Créditos: 04	QP327 - Interpretação e Atribuição de Espectros de RMN 1D e 2D Não há pré-requisitos para essa disciplina. Profs. Drs. Denize Cristina Favaro (coordenadora) e Cláudio Francisco Tormena Vagas: Mínimo: 10 e Máximo: 30 Dias: Terças e Quintas das 18 às 20h
Ementa:	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.
Conteúdo Programático:	Momento angular e momento magnético, núcleo magnético, interação campo magnético núcleo magnético, origem do sinal em RMN Deslocamento químico em espectros de RMN 1H e 13C, interpretação dos deslocamentos químicos de alguns grupos funcionais em química orgânica. Padrões dos sinais em espectros de RMN de 1H. Sinais de 1ª e 2ª ordens; não equivalência química e magnética. Acoplamentos com outros núcleos (15N, 19F e 31P). Efeito isotópico (efeito vibracional) no deslocamento químico. Efeito de troca em RMN. Espectros de RMN 1D (1H, 13C, DEPT45, DEPT90 e DEPT135), alguns parâmetros de aquisição e de processamento. Interpretação de alguns espectros. RMN 1D e 2D com supressão do sinal do solvente alguns parâmetros de aquisição e de processamento → Foco em peptídeos. Espectros 2D homonuclear (COSY, NOESY, ROESY, TOCSY, INADEQUATE e ADEQUATE), parâmetros de aquisição e de processamento. Interpretação de alguns espectros. 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. Espectros de RMN 2D heteronuclear (HMBC). Parâmetros de aquisição e de processamento. Interpretação de alguns espectros. Interpretação e atribuição das ressonâncias para um peptídeo com estrutura primária conhecida (1D e 2D – 15N-HSQC; 13C-HSQC; TOCSY; NOESY; HMBC). Interpretação e atribuição da estrutura molecular para um conjunto de espectros de 1D e 2D para compostos com estrutura conhecida. Interpretação e atribuição da estrutura molecular para um conjunto de espectros de 1D e 2D para amostras com estruturas desconhecidas.
Bibliografia:	<ol style="list-style-type: none"> 1. J. H. Simpson, Organic Structure Determination using 2D NMR spectroscopy; Elsevier, 2008. 2. T. D. W. Claridge, High-resolution NMR techniques in organic chemistry; 3rd edition; Elsevier, 2016. 3. J. Keeler, Understanding NMR spectroscopy, 2nd edition; Wiley, 2010. 4. K. Wüthrich, NMR of proteins and Nucleic acids; Wiley, 1991. 5. G. S. Rule & T. K. Hitchens, Fundamentals of Protein NMR Spectroscopy; Springer, 2006. 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.

Disciplina: Pré-Requisitos: Turma: S Créditos: 04	QP414 - Tópicos Especiais em Química Analítica II Não há pré-requisitos para essa disciplina. Profa. Dra. Márcia Cristina Breikreitz Vagas: Mínimo: 05 e Máximo: 15 - (não aberta a alunos especiais) Dias: Segundas e Quartas das 14 às 16h
Ementa:	"Estatística aplicada" 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.
Conteúdo Programático:	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.
Bibliografia:	Miller, J. C. e Miller, J. N. Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry, 6th ed., Pearson, England, 2010. Bolton, S. Pharmaceutical Statistics: practical and clinical applications, 3rd ed., Marcel Dekker Inc., New York, 1997. Skoog D. A, West D. M, Holler FJ, Crouch S. R. Fundamentos de Química Analítica, Cengage Learning, São Paulo, 2006. Harris, D. C. Análise Química Quantitativa, LTC Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, 2008. Bruns, R., E., Scarminio, I., S., de Barros Neto, B. Como fazer experimentos: aplicações na ciência e na indústria, 4ª ed., Bookman, SP, 2010. Box, G. E. P., Hunter, J. S., Hunter, W. G. Statistics for Experimenters, John Wiley and Sons, New Jersey, 2005. Draper, N. e Smith. H. Applied Regression Analysis, 3rd ed., Wiley, EUA, 1998.

Disciplina: Pré-Requisitos: Turma: S Créditos: 04	QP416 - Tópicos Especiais em Química Analítica IV Não há pré-requisitos para essa disciplina. Profs. Drs. Carlos Henrique Inácio Ramos, Fabio Augusto, José Alberto Fracassi da Silva (coordenador), Lauro Tatsuo Kubota e William Reis de Araujo Vagas: Mínimo: 05 e Máximo: 25 Dias: Terças e Quartas das 14 às 16 horas.
Ementa:	"Métodos em Bioanalítica" Introdução aos métodos bioanalíticos. Aplicação de técnicas modernas em problemas envolvendo biomoléculas e/ou sistemas biológicos. Preparo de amostras em bioanálise. Técnicas de separação em bioanalítica. Técnicas espectroanalíticas e espectrométricas aplicadas em bioanálise. Sensores químicos.
Conteúdo Programático:	Introdução aos métodos utilizados em bioanalítica; Métodos de preparo de amostra em bioanálise; Métodos de separação cromatográficos aplicados a biomoléculas; Métodos de separação eletroforéticos aplicados a biomoléculas; Biossensores e sensores vestíveis e POC (Point of Care); Dicroísmo Circular; Técnicas para o estudo de proteínas, DNA e RNA; Espectrometria de massas; Tecnologia de Microarrays.
Bibliografia:	1. Mikkelsen, S. R., Cortón, E.; Bioanalytical Chemistry, Wiley-Interscience, New Jersey, USA, 2004. 2. Strege, M. A., Lagu, A. L. (eds.); Capillary Electrophoresis of proteins and peptides – Methods in molecular biology, vol. 276, Humana Press, New Jersey, USA, 2004. 3. Scopes, R. K.; Protein Purification – Principles and practice, 3 rd Ed., Springer, Boston, USA, 1994. 4. Collins, C. H., Braga, G. L., Bonato, P. S.; Fundamentos de Cromatografia, Ed. Unicamp, Campinas, SP, 2006. 5. Hamdan, M., Righetti, P. G.; Proteomics Today – Protein assessment and biomarkers using mass spectrometry, 2D electrophoresis, and microarray technology, Wiley Interscience, New Jersey, USA, 2005. 6. Eggins, B.R.; Biosensors: An Introduction, John Wiley & Sons, Chichester, 2006. 7. Hoffman, E., Stroobant, V.; Mass Spectrometry: Principles and Applications, 3 rd Ed., Wiley, 2007. 8. Vandenberghe, P., Practical Raman Spectroscopy: An Introduction, Wiley, 2013.

Disciplina: Pré-Requisitos: Turma: S Créditos: 02	QP648 - Tópicos Especiais em Química Inorgânica VI Não há pré-requisitos para essa disciplina. Profa. Dra. Daniela Zanchet Vagas: Mínimo: 01 e Máximo: 20 Dias: Sextas das 14 às 16h
Ementa:	"Introdução às Técnicas de Microscopia Eletrônica" Interação elétron-matéria. Microscopia eletrônica: varredura e transmissão. Aplicação da microscopia eletrônica no estudo de materiais.
Conteúdo Programático:	Revisão sobre propriedades estruturais e eletrônicas de sólidos. Interação elétron-matéria. Tipos de microscopia eletrônica: varredura e transmissão. Tipos de informação: morfologia, estrutura cristalina, resolução atômica, composição química, propriedades eletrônicas. Funcionamento de microscópios e exemplos práticos.
Bibliografia:	Transmission Electron Microscopy: A textbook for Materials Science D.B. Williams, C.B. Carter Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis J.I. Goldstein, D.E. Newbury, J.R. Michael, N.W.M. Ritchie, J.H.J. Scott, D.C. Joy Material complementar a ser fornecido pela professora.

Disciplina: Pré-Requisitos: Turma: S Créditos: 02	QP742 - Tópicos Especiais em Físico-Química XVI Não há pré-requisitos para essa disciplina. Prof. Dr. Fernando Galembeck Vagas: Mínimo: 05 e Máximo: 30 Dias: Quartas das 21 às 23h
Ementa:	"Captura de Energia Ambiental: Fenômenos, Materiais e Resultados" Energia no ambiente. Possibilidades e limites termodinâmicos. Eletricidade no meio ambiente. Sistemas desenvolvidos: fotovoltaicos, fototérmicos e eólicos. Novos candidatos: geradores osmóticos e de ondas, piezoelectricidade, termoelectricidade, higroelectricidade, elasto-eletricidade. Geração em grande e pequena escalas, geração distribuída e a digitalização da sociedade.
Conteúdo Programático:	As formas de energia ambiental e os limites termodinâmicos. Aspectos históricos. Processos implementados em grande escala. Novos candidatos e suas perspectivas. Microgeração. Captura de energia ambiental, a Internet das Coisas, a indústria 4.0 e a digitalização da sociedade.
Bibliografia:	Bibliografia Básica F. Galembeck e T. A. L. Burgo, Chemical Electrostatics, Springer, Cham, 2017. Rein André Roos, The Forgotten Pollution, Kluwer, Dordrecht 1996. Reccab Manyala (editor), Energy Harvesting, Intech Open, London, 2018 Bibliografia Complementar / Avançada

 **Disciplina não será oferecida**

Disciplina: Pré-Requisitos: Turma: S Créditos: 02	QP812 - Tópicos Especiais em Química Analítica VIII Não há pré-requisitos para essa disciplina. Profa. Dra. Cassiana Carolina Montagner Vagas: Mínimo: 05 e Máximo: 20 Dias: Terças das 10 às 12h
Ementa:	"Ecotoxicologia Ambiental" Aspectos analíticos envolvidos nas questões relacionadas a ecotoxicologia. Desafios instrumentais e estatísticos, contaminantes orgânicos, avaliação de risco, fontes, comportamento e destino no ambiente, saneamento básico.
Conteúdo Programático:	Quantificando os contaminantes ambientais Destino dos contaminantes no ambiente Monitoramento ambiental Toxicologia ambiental Bioensaios, biomarcadores de exposição Avaliação do risco ambiental e para a saúde humana Effect Direct Analysis Aspectos regulatórios Tecnologias de remoção e mitigação de contaminantes ambientais

Bibliografia:	<p>Baird, C. Química Ambiental. Editora Bookman, Porto Alegre, 2004</p> <p>Skog, West & Holler.; Fundamentos de química analítica, tradução de Marco Tadeu Grassi , revisão técnica de Celio Pasquini. São Paulo, SP: Thomson Learning, 2007</p> <p>Umbuzeiro, GA. Guia de potabilidade para substâncias químicas. ABES, 2012</p> <p>Azevedo e Chasin, As Bases Toxicológicas da Ecotoxicologia, São Carlos, Rima, 2003</p> <p>Zagatto & Bertolotti. Ecotoxicologia Aquática – Princípios e aplicações. São Carlos, Rima, 2006</p> <p>Mozeto, Umbuzeiro & Jardim. Métodos de Coleta, Análises físico-químicas e ensaios biológicos e ecotoxicológicos de sedimento de água doce. São Carlos, Cubo ed., 2006</p> <p>Rand, GM Fundamentals of Aquatic Toxicology, USA, Ed. Taylor & Francis, 1995</p> <p>Schwarzenbach, R. Environmental organic chemistry. 2nd ed. Hoboken, N.J.: Wiley, c2003. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1002/0471649643>.</p> <p>Dunnivant, F.M. A basic introduction to pollutant fate and transport: an integrated approach with chemistry, modeling, risk assessment, and environmental legislation. Hoboken, N.J.: Wiley-Interscience, c2006. http://dx.doi.org/10.1002/0471758132</p> <p>Bases de dados:</p> <p>www.sciencedirect.com, scielo, portal capes</p> <p>http://dar.efsa.europa.eu/dar-web/provision,</p> <p>ANVISA – monografias, MAPA (Agrofit) IBAMA, MMA</p> <p>www.inchem.org; http://ntp.niehs.nih.gov; http://cfpub.epa.gov/ecotox/</p>
----------------------	--

Disciplina: Pré-Requisitos: Turma: S Créditos: 04	<p>QP936 – Tópicos Especiais em Físico-Química XII</p> <p>Não há pré-requisitos para essa disciplina.</p> <p>Prof. Dr. Adalberto Bono M. S. Bassi</p> <p>Vagas: Mínimo: 03 e Máximo: 30</p> <p>Dias: Terças e Quintas das 10 às 12h</p>
--	---

Ementa:	<p>"Termodinâmica Química Temporal"</p> <p>Conceitos básicos: condições homogênea, estacionária e de equilíbrio; primeira lei; segunda lei de Boltzmann-Gibbs-Shannon; potencial químico e sua homogeneidade; capacidades térmicas e propriedades parciais molares; desigualdades de Clausius. Aplicações químicas: extensões de reação; afinidade química; reversão e reversibilidade de reação; equilíbrio cinético; leis cinéticas; energias de alteração térmica; reação química elementar; propriedades padrão e constante de equilíbrio químico; fugacidade e atividade. Regra de fases: conceito, diagramas de fases para única espécie química e para soluções. Tópicos complementares.</p>
----------------	--

Conteúdo Programático:	<ol style="list-style-type: none"> 1. as propriedades e os processos termodinâmicos; 2. os conceitos matemáticos básicos: equações diferenciais exatas e inexatas; 3. as definições de sistema e processo homogêneo, estacionário e em equilíbrio; 4. as diversas teorias termodinâmicas; 5. o conceito de fronteira e sua utilização; 6. a primeira lei em termos conceituais e as consequentes equações diferenciais e integrais para energia interna e entalpia; 7. a segunda lei em termos conceituais, conforme as teorias estatísticas de Boltzmann e Gibbs, complementadas pela teoria informática de Shannon; 8. os conceitos de entropia, energias de Helmholtz e Gibbs, de acordo com as supracitadas teorias; 9. o potencial químico; 10. os sistemas e os processos termo-baricamente e de potencial químico homogêneos; 11. as capacidades térmicas; 12. as propriedades parciais molares; 13. a segunda lei da termodinâmica de acordo com Clausius: as desigualdades de Clausius diferenciais, integrais e as aplicações práticas das desigualdades integrais; 14. os conceitos de única reação química, parâmetros de reação e alteração idêntica; 15. os conceitos de extensões absoluta e relativa de reação; 16. a afinidade química; 17. os conceitos de exergonia, endergonia e equilíbrio químico; 18. definição de reação reversa, reversível e irreversível; 19. o equilíbrio cinético da reação; 20. a lei cinética, sua forma padrão e exemplo de forma não-padrão; 21. a energia molar de alteração térmica; 22. a energia de ativação de Arrhenius; 23. o conceito de reação química elementar e as correspondentes lei cinética e energia molar de alteração térmica; 24. a interpretação estatística da lei de Arrhenius em reação química elementar; 25. as propriedades padrão de reação e suas alterações térmicas; 26. os conceitos de quociente de reação e constante termodinâmica de equilíbrio químico; 27. a constante termodinâmica de equilíbrio químico para gases perfeitos e as constantes não-termodinâmicas; 28. o conceito de fugacidade; 29. a constante termodinâmica de equilíbrio químico para soluções líquidas diluídas; 30. o conceito de atividade; 31. a regra de fases; 32. a explicação das transições de fase para única espécie química, por meio da variação do seu potencial químico com temperatura e pressão; 33. os diagramas de fases e o estudo das suas curvas de equilíbrio, para única espécie química; 34. os diagramas de fases para soluções líquidas binárias ideais, não-ideais, azeotrópicas e para solubilidade parcial; 35. tópicos complementares ou substitutivos, de interesse dos alunos
-------------------------------	---

Bibliografia:	<p>Bibliografia Básica</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Livro submetido para publicação pelo professor da disciplina, que será fornecido aos alunos em formato pdf. 2. Alberty, R. A., Use of Legendre Transforms in Chemical Thermodynamics - International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) Technical Report, Pure Appl. Chem., 73, 8 (2001), 3. McQuarrie, Donald A.; Simon John D., Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books (2016). <p>Bibliografia Complementar / Avançada</p>
----------------------	---

Disciplina: Pré-Requisitos: Turma: A Créditos: 04	<p>QP937 - Química Verde: Princípios e Aplicações</p> <p>Não há pré-requisitos para essa disciplina.</p> <p>Prof. Dr. Julio Cezar Pastre</p> <p>Vagas: Mínimo: 10 e Máximo: 20</p> <p>Dias: Segundas e Quartas das 16 às 18h</p>
--	--

Ementa:	<p>Sustentabilidade e Química Verde. Princípios e métricas da Química Verde. Matérias-primas renováveis. Solventes verdes. Catálise. Prevenção da geração de resíduos. Desenho para risco reduzido. Exemplos industriais da aplicação da Química Verde.</p>
----------------	---

Programa:	<ol style="list-style-type: none"> 1. Sustentabilidade e Química Verde <ol style="list-style-type: none"> 1.1. Sustentabilidade - mitos e fatos 1.2. Histórico e definição da Química Verde 1.3. Green washing 1.4. Avaliação do ciclo de vida
------------------	--

<p>Conteúdo Programático:</p>	<p>2. Princípios da Química Verde 2.1. Os doze princípios da Química Verde 3. Métricas da Química Verde 3.1. Por que precisamos de métricas em QV? 3.2. Métricas Estabelecidas em Química Verde 3.2.1. Economia Atômica 3.2.2. Fator Ambiental (Fator E) 3.2.3. Utilização atômica 3.2.4. Eficiência de massa de reação 4. Matérias-Primas Renováveis 4.1. Consumo de energia e matéria-prima 4.2. Petróleo 4.3. Matérias-primas renováveis 4.4. Insumos renováveis como fonte de energia 4.5. Feedstocks de primeira, segunda e terceira geração 4.6. As vantagens e desvantagens do biocombustível 5. Solventes Verdes 5.1. Solventes convencionais 5.2. Solventes alternativos 5.3. Seleção de solventes 5.4. Substituição de solvente 6. Prevenção de Resíduos 6.1. A pirâmide de tratamento de resíduos 6.2. Redução do uso de solventes 6.3. Resíduos como matéria-prima 6.4. Biodegradação de resíduos 7. Catálise 7.1. Energia de Ativação para Reação 7.2. O que é um catalisador? 7.3. Tipos de catalisadores 7.4. Catalisadores e Sustentabilidade 7.5. Catálise enzimática 7.6. Catálise organometálica 7.7. Organocatálise 8. Desenho para o Risco Reduzido 8.1. Perigo e risco - passado e presente 8.2. Toxicologia 8.3. Avaliando os perigos e a exposição 8.4. Minimização de perigo através do desenho molecular 8.5. QSAR - Relação de Atividade de Estrutura Quantitativa 9. Da Teoria para a Prática 9.1. Exemplos industriais da aplicação da Química Verde 9.1.1. Processos para produção de produtos farmacêuticos 9.1.2. Processos para a produção de insumos químicos 9.2. Estudos de casos empregando o "Green Chemistry Challenge Award", análise crítica de artigos científicos, etc.</p>
<p>Bibliografia:</p>	<p>[1] Anastas, P.T., Warner, J.C., Green Chemistry: Theory and Practice, Oxford University Press, New York, 1998. [2] Lancaster, M., Green Chemistry: an introductory text, Cambridge, Royal Society of Chemistry, 2002 [3] Kirchoff, M.M., Promoting sustainability through green chemistry, Resources, Conservation and Recycling 44, 237, 2005. [4] Corrêa, A.G., Zuin, V.G. (organizadoras), Química Verde: Fundamentos e Aplicações, São Carlos; Ed. da UFSCar, 2009. [5] Green Chemistry and Catalysis. R.A. Sheldon, I. Arends, U. Hanefeld. Wiley – VHC. 2007. [6] Silva, F.M.; Lacerda, P.S.B.; Jones Jr., J. Desenvolvimento sustentável e Química Verde. Química Nova, 28(1), 103, 2005. [7] Lenardão, E.J., Freitag, R.A., Dabdoub, M.J., Batista, A.C.F., Silveira, C.C., "Green Chemistry" – Os 12 princípios da Química Verde e sua inserção nas atividades de ensino e pesquisa, Química Nova, 26(1), 123, 2003. [8] Ballini, R., Eco-Friendly Synthesis of Fine Chemicals, Ed. Bellini, R., RSC Publishing, Science Pard, Cambridge, UK, 2009.</p>