



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE QUÍMICA
Coordenadoria de Pós-Graduação



DISCIPLINAS OFERECIDAS NAS FÉRIAS DE VERÃO 2024	
MATRÍCULA EM DISCIPLINAS DE FÉRIAS DE VERÃO 2024 PARA ALUNOS REGULARES: 18 e 20 de dezembro de 2023	
Obs: A QP100 é recomendada aos alunos que participarão do Programa de Estágio Docente (PED)	
Disciplina: QP100	QP100 - Introdução à Docência no Ensino Superior de Química I
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
Turma: A	Prof. Dr. Leandro Antonio de Oliveira
Créditos: 1 (15h)	Vagas: Mínimo: 05 e Máximo: 50
Sala: Miniauditório	Dias: 05/02 das 8 às 12h e das 14 às 18h e 07/02 das 9 às 12 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:	OBJETIVO GERAL Objetiva trazer ao futuro estagiário docente noções básicas relacionadas ao ensino superior, técnicas e recursos didáticos, avaliação da aprendizagem e a compreensão do perfil do estudante de nível superior. Deste modo, almeja-se instrumentalizar os alunos para a elaboração e execução de disciplinas de cursos de graduação em Química e em áreas correlatas. OBJETIVOS ESPECÍFICOS / COMPETÊNCIAS • Proporcionar reflexões sobre a função docente no contexto da graduação em química e áreas correlatas fornecendo subsídios para o planejamento, intervenção e avaliação do processo de ensino-aprendizagem. • Analisar a dinâmica do processo de ensino-aprendizagem. • Conhecer os recursos didáticos e de avaliação disponíveis para a abordagem dos temas bem como tecnologias destinadas ao ensino. • Proporcionar situações problemas e contextualizadas para a reflexão crítica a respeito do trabalho docente e da relação professor-aluno. • Discutir situações de ensino-aprendizagem reais propondo intervenções. 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. METODOLOGIA E ESTRATÉGIA DE ENSINO O curso consistirá um ciclo de aulas ministradas pelo professor proponente e por especialistas convidados. Durante as aulas, os temas propostos na ementa serão abordados de forma teórica e a partir de atividades práticas com base em situações reais ou simuladas de ensino. RECURSOS DIDÁTICOS O curso é baseado em rodas de discussão sobre textos e artigos, e material de apoio para a discussão do conteúdo do curso. Pelo menos uma aula será realizada no laboratório de informática de modo a trabalhar com questões relacionadas aos ambientes virtuais de aprendizagem e a recursos digitais.
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 1º SEMESTRE DE 2024	
MATRÍCULA EM DISCIPLINAS PARA ALUNOS REGULARES PARA O 1º SEMESTRE DE 2024: DE 04 a 20 de dezembro de 2023	
INÍCIO DO SEMESTRE: 28/02/2024 - TÉRMINO DO SEMESTRE: 06/07/2024	

DISCIPLINAS DE DISSERTAÇÃO E TESE – Matrícula semestral (automática, não devem ser inseridas 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 devem ser inseridas 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 SEMINÁRIOS	
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 1º SEMESTRE DE 2024	
MATRÍCULA EM DISCIPLINAS PARA ALUNOS REGULARES PARA O 1º SEMESTRE DE 2024: DE 04 a 20 de dezembro de 2023	
INÍCIO DO SEMESTRE: 28/02/2024 - TÉRMINO DO SEMESTRE: 06/07/2024	
DISCIPLINAS	

Disciplina: QP021	QP021 - Química Orgânica Avançada
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina
Turma: A	Prof. Dr. Prof. Dr. Rodrigo Antonio Cormanich
Créditos: 4	Vagas: mínimo 5 - máximo 25
Sala: Miniauditório	segundas e quintas das 19 às 21h
Ementa:	Ligação química e estrutura. Estereoquímica. Análise conformacional, efeitos estéreos e estereoeletrônicos. Mecanismos de reações orgânicas: estudos de dados cinéticos e termodinâmicos, efeito isotópico, uso de informações de acidez e basicidade, efeito de solventes, intermediários de reações. Reações pericíclicas. Reações de substituição nucleofílica, adição e eliminação. Aspectos importantes de reações com organometálicos baseadas em metais de transição. Reações radiculares.
Conteúdo Programático:	1. Teoria de orbitais moleculares: Estrutura molecular. Orbitais moleculares. 2. Estrutura molecular e termodinâmica de compostos orgânicos. 3. Análise conformacional: Análise conformacional em sistemas cíclicos e acíclicos; efeito estérico, efeito eletrônico e efeitos estereoeletrônicos em reações orgânicas. 4. Acidez e basicidade: PKa, acidez e basicidade de moléculas orgânicas. Efeito da interação de orbitais. 5. Estereoquímica: Enantiômeros, diastereoisômeros, relação entre estereoquímica e mecanismos de reação. 6. Mecanismos de reação: Métodos de determinação de mecanismos de reação, efeito isotópico, efeito do solvente, catálise ácida e efeito da estereoquímica no mecanismo de reações. 7. Intermediários reativos: carbânions, carbocátions, radicais livres e carbenos. 8. Substituição nucleofílica alifática: Mecanismos de substituição nucleofílica alifática (SN1 e SN2). 9. Reações de eliminação: Mecanismos de reações de eliminação E2 e E1. Efeitos de orbitais moleculares. 10. Radicais livres: Introdução a reações radiculares. 11. Mecanismos de adição em compostos carbonílicos: Adição de nucleófilos em aldeídos e cetonas; Reações de adição/eliminação em aldeídos e cetonas; Mecanismos de substituição nucleofílica em carbonilas. 12. Reações concertadas pericíclicas: Conceito de reações pericíclicas; Tipos de reações pericíclicas; Reações eletrocíclicas térmicas e fotoquímicas; Mecanismos pela abordagem dos orbitais moleculares de fronteira; Reações Sigmatrópicas térmicas e fotoquímicas com migrações de hidrogênio supra ou antarafaciais, com inversão e com retenção de configuração; A reação de cicloadição de Diels-Alder
Bibliografia:	Carey, F. A., Sundberg, R. J., Advanced Organic Chemistry, Partes A&B, Springer (2008) Eliel, E. L & Wilen, S. H., Stereochemistry of Organic Compounds, Wiley (1994) Anslyn, E. V.; Dougherty, D. A. Modern physical organic chemistry. University Science: California, 2006. Fleming, I. Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions, Wiley, New Jersey, 2010. Clayden, J. Greeves, N., Warren, S., Organic Chemistry, Oxford Press (2012) Material de aula disponibilizado pelo professor

Disciplina: QP125	QP125 - Introdução à Termodinâmica e a Cinética
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina
Turma: A	Prof. Dr. Pablo Sebastian Fernandez
Créditos: 4	Vagas: mínimo 5 - máximo 30
Sala: SEG na IQ-02 e QUI na IQ-03	segundas e quintas das 14 às 16h
Ementa:	Sistemas, estados e variáveis; Transformações, espontaneidade, reversibilidade, complexidade. Leis da Termodinâmica, Energia, Entropia e Funções de Estado; Distribuição de Boltzmann; Potencial químico; Equilíbrio de fases; Superfícies e Interfaces; Equilíbrio químico; Eletroquímica; Leis Cinéticas e Mecanismos de Reações; Teoria cinética dos gases; dinâmica das Reações Químicas; Teorias da Cinética Química. Sistemas distantes do equilíbrio.
Conteúdo Programático:	1) Conceitos de sistema, meio, variáveis termodinâmicas, equilíbrio térmico e propriedades; funções de estado. 2) Gases ideais e gases reais; interações intermoleculares. 3) Leis da Termodinâmica, reversibilidade e equilíbrio 4) Aspectos moleculares da energia interna, calor, entalpia, capacidade calorífica, entropia, trabalho generalizado. 5) Relações fundamentais sistemas fechados: Funções de Gibbs e Helmholtz (energias livres); 6) Relações fundamentais sistemas abertos: Potencial químico, equilíbrio de fases e equilíbrio químico. 7) Aplicações: Diagramas de fase; Eletrólitos e reações eletroquímicas, Teoria de Debye-Huckel 8) Leis cinéticas e mecanismos de reações. 9) Teoria cinética dos gases 10) Dinâmica de reações, teorias e métodos experimentais.
Bibliografia:	Bibliografia Básica McQUARRIE, D.A. and SIMON, J.D., Physical Chemistry, A Molecular Approach. Univ. Science Books, 1997; Dos mesmos autores: Molecular Thermodynamics ALBERTY, R. A. & SILBEY, R. J., Physical Chemistry, J. Wiley & Sons, 1992 LAIDLER K. J., Chemical Kinetics. 3a ed., Harper & Row, 1987; LAIDLER & MEISER, Physical Chemistry, Houghton Mifflin Co., NY, 3rd Edition ,1999 LEVINE, Ira N., Physical Chemistry. 6a ed., MacGraw Hill, 2008. BERRY R. S., RICE S. A. & ROSS J., Physical Chemistry. 2a ed., Oxford, 2000

Disciplina: QP129	QP129 - Físico-Química de Soluções Poliméricas e Surfactantes
Pré-Requisitos:	(QP124) ou (QP125) ou (AA200)
Turma: A	Prof. Dr. Edvaldo Sabadini (coordenador) e Prof. Dr. Watson Loh
Créditos: 4	Vagas: mínimo 5 - máximo 20
Sala: TERÇA na IQ-03 e SEXTA no LIFE	terças das 10 às 12h e sextas das 14 às 16h
Ementa:	Introdução a surfatantes. Associação de surfatantes em solução. Diagramas de fase de soluções de surfatantes. 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/surfatantes.
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:	Bibliografia Básica - 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. Bibliografia Complementar / Avançada

Disciplina: QP150	QP150 - Espectroscopia de Ions Lantanídeos: Fundamentos e Aplicações
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina
Turma: A	Prof. Dr. Fernando Aparecido Sigoli
Créditos: 2	Vagas: mínimo 1 - máximo 15
Sala: IQ-02	terças das 21 às 23h (acompanha graduação)
Ementa:	Revisão da Teoria de grupo. Campo ligante, Teoria de Judd-Ofelt, regras de seleção, transições polarizáveis e mecanismos radiativos e não-radiativos, rendimento quântico, instrumentação e aplicações de compostos contendo íons lantanídeos.
Conteúdo Programático:	- Revisão da Teoria de Grupo; - Configuração eletrônica e níveis de energia do íon livre; - Termos espectroscópicos; regras de seleção das transições eletrônicas; influência do campo ligante e da simetria nos níveis de energia e nas regras de seleção; representação irreduzível de estados eletrônicos oriundos dos orbitais f ; - Mecanismos e intensidades de transições intraconfiguracionais f-f; transições f-f polarizáveis; transições 4f-5d; - Teoria de Judd-Ofelt e suas extensões; efeito antena e transferência de carga; - Mecanismos de supressão de emissão; - Tempos de vida de estados excitados e sua dependência com o índice de refração e com processos de transferência de energia ou de carga; - Rendimentos quânticos absoluto e relativo; - Conversão ascendente de energia; - Instrumentação; - Aplicações de dispositivos luminescentes.
Bibliografia:	Bibliografia básica 1. SIGOLI, F.A.; BISPO, A.G., DE SOUSA FILHO, P.C. (Orgs.) Lantanídeos: química, luminescência e aplicações. Campinas: Átomo, 2022. 422p. 2. BLASSE, G., GRABMAIER, B. C. Luminescent materials. Berlin: Springer-Verlag, 1994. 233p. E-book. 3. COTTON, F.A. Chemical applications of group theory. 3a Ed. New York: John Wiley & Sons, 1990. 461p. 4. LEVER, A.B.P. Inorganic Electronic Spectroscopy. 2ª Ed. Amsterdam: Elsevier, 1984. 863p. 5. LAKOWICZ, J.R. (Ed.) Principles of Fluorescence spectroscopy. 3ª Ed. Boston: Springer, 2006. 954p. E-book. Bibliografia Complementar / Avançada 1. KETTLE, S. F. A. Symmetry and structure: readable group theory for chemists. 2ª Ed., Chichester: John Wiley & Sons, 1995. 426p. E-book. 2. KITAI, A. H. Solid state luminescence: Theory, materials and devices. London: Chapman & Hall, 1993. 386p. 3. RONDA, C. (Ed.) Luminescence: from theory to applications. Weinheim: Wiley, 2008. 260p. E-book. 4. HUHEEY J. E.; KEITER E. A.; KEITER R. L. Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity. 4ª Ed. New York: Harper Collins, 1993. 964p. 5. HÄNNINEN, P.; HÄRMÄ, H. Lanthanide luminescence: Photophysical, analytical and biological aspects. Berlin: Springer, 2011. 388p. E-Book.

Disciplina: QP157	QP157 - Periodicidade e Ligações Químicas
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina
Turma: A	Prof. Dr. André Luiz Barboza Formiga
Créditos: 4	Vagas: mínimo 5 - máximo 30
Sala: TER na IQ-02 e QUI no MINIAUDITORIO	terças e quintas das 14 às 16h
Ementa:	Similaridades e dissimilaridades nos elementos químicos. Propriedades periódicas. Estudo da formação dos compostos e formação de ligações múltiplas.
Conteúdo Programático:	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. Efeitos relativísticos e efeitos do par inerte. 6. Relações Diagonais. 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 dos Grupos 13, 14 e 15: propriedades e estrutura.
Bibliografia:	Bibliografia básica 1. HUHEEY J. E.; KEITER E. A.; KEITER R. L. Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity. 4ª Ed. New York: Harper Collins, 1993. 964p. 2. GREENWOOD, N. N.; EARNSHAW, A. Chemistry of the Elements. 2ª Ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1997. 1341p. E-book. 3. COTTON, F. A.; WILKINSON, G.; MURILO, C. A.; BOCHMANN, M. Advanced Inorganic Chemistry. 6ª Ed. New York: John Wiley & Sons, 1999. 1354p. 4. FRENKING, G.; SHAIK, S. (Ed.). The chemical bond: chemical bonding across the periodic table. Weinheim: Wiley-VCH, 2014. 544p. E-book. 5. FRENKING, G.; SHAIK, S. (Ed.). The chemical bond: fundamental aspects of chemical bonding. Weinheim: Wiley-VCH, 2014. 411p. E-book. 6. MIESSLER, G.L.; TARR, D.A. Inorganic chemistry. 5ª Ed. Upper Saddle River: Prentice-Hall, 2014. 673 p. 7. LI, W.-K.; ZHOU, G.-D.; MAK, T.C.W. Advanced structural inorganic chemistry. New York: Oxford University Press, 2008. 819 p. E-book. Bibliografia complementar/avançada 1. Textos e artigos selecionados pelo(a) docente. 2. BARRET, J. Atomic structure and periodicity. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2002. 184p. E-book. 3. MINGOS, M.P. (Ed.). The Chemical Bond I: 100 Years Old and Getting Stronger. Cham: Springer International Publishing, 2016. 252p. E-book. 4. MINGOS, M.P. (Ed.). The Chemical Bond II: 100 Years Old and Getting Stronger. Cham: Springer International Publishing, 2016. 267p. E-book.

Disciplina: QP212	QP212 - Métodos Eletroquímicos de Análise
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina
Turma: A	Prof. Dr. William Reis de Araujo
Créditos: 4	Vagas: mínimo 5 - máximo 20
Sala: IQ-03	quartas e sextas das 16 às 18h
Ementa:	Introdução aos métodos eletroquímicos de análise, condutometria, potenciometria, coulometria, eletrogravimetria, amperometria, voltametria, mecanismos de reações acopladas, técnicas de concentração, eletrodos modificados, sensores e biossensores eletroquímicos, cronopotenciometria, espectroeletroquímica, espectroscopia de impedância eletroquímica, ultramicroeletrodos, microscopia eletroquímica de varredura.
Conteúdo Programático:	Introdução aos métodos eletroquímicos de análise: Princípios básicos, conceitos gerais e classificação dos métodos. Condutometria: Fundamentos básicos, mobilidade, transporte, instrumentos de medida e aplicações básicas da condutometria. Potenciometria: Princípio da técnica, medidas de potencial, eletrodos de referência, eletrodos indicadores, classificação dos eletrodos, eletrodos metálicos, eletrodos de membrana, eletrodo de vidro, eletrodos para gases, mecanismos de respostas, células de medida, seletividade, avaliação de interferência, titulação potenciométrica e aplicações. Títulos de Karl Fischer: Introdução e princípios, tipos de titulação, limites e faixa de detecção, reagentes utilizados, dificuldades e limitações. Coulometria: Princípio da técnica, curvas de polarização, coulometria amperostática, potencioestática, eletrogravimetria, instrumento de medida de carga e aplicações. Voltametria: Histórico, fundamento básico, formas do sinal de excitação, tipos de eletrodos, relação entre corrente e potencial elétrico, mecanismos do processo de resposta, determinação de potencial formal, de meia onda e de pico. Polarografia clássica, polarografia de corrente contínua normal e amostrada, polarografia de pulso normal, de pulso diferencial e de onda quadrada. Voltametria de redissolução e voltametria adsorbtiva. Voltametria de varredura linear e voltametria cíclica. Aplicações da voltametria na determinação de compostos inorgânicos e orgânicos. Técnicas de pré-concentração Voltametria de redissolução anódica e catódica, voltametria adsorbtiva, especiação e eletrodos modificados. Cronopotenciometria: Fundamento da técnica e aplicações. Mecanismos de reações eletroquímicas: Fundamentos, tipos de reações, transferência de elétrons, reações acopladas e mecanismos de reações. Eletrodos modificados: Princípios e aplicações Sensores e biossensores: Definição, tipos de sensores, forma de preparo, desenvolvimento e aplicação. Ultramicroeletrodos: Princípio, utilização e aplicações. Microscopia Eletroquímica de Varredura: Princípio e aplicações. Espectroscopia de Impedância eletroquímica: Fundamento da técnica e aplicações eletroanalíticas.

Bibliografia:	Bibliografia: T. Edmonds (Ed.), Chemical Sensors, Blackie, Glasgow, 1988. A. J. Bard and L.R. Faulkner, Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications, John Wiley & Sons, second edition, New York, 2001. P.T. Kissinger and W.R. Henieman (Eds), Laboratory Techniques in Electroanalytical Chemistry, 2nd ed. Marcel Dekker, New York, 1996. R.W. Murray, Chemically Modified Electrodes in A. J. Bard (Ed) Electroanalytical Chemistry, vol. 13, Marcel Dekker, New York, 1984. R.W. Murray, Molecular Design of Electrode Surfaces, vol 22, John Wiley & Sons, New York, 1992. D.R. Crow, Principles and Applications of Electrochemistry, Third edition, Chapman & Hall, London, 1988. K. Brainina and E. Neyman, Electroanalytical Stripping Methods, vol 126, John Wiley & Sons, New York, 1993. K.B. Oldham and J.C. Myland, Fundamentals of Electrochemical Science, Academic Press, Inc. London, 1994. D. Pletcher and F.C. Walsh, Industrial Electrochemistry, second edition, Blackie Academic & Professional, 1990. J.A. Plambeck, Electroanalytical Chemistry: Basic Principles and Applications, John Wiley & Sons, New York, 1982. P.L. Bailey, Analysis with Ion Selective Electrodes, 2nd Edition, Hayden & Sons, 1980. Southampton Electrochemistry Group: Instrumental Methods in Electrochemistry, John Wiley & Sons, New York, 1985. R.L. McCreery, Electroanalytical Chemistry, A.J. Bard (Ed) vol 17, Marcel Dekker, Inc., New York, 1991. A. M. Bond, Modern Polarography Methods in Analytical Chemistry, Marcel Dekker, New York, 1980. I.M. Kolthoff and J.J. Lingane, Polarography, 2nd Edition, Wiley-Interscience, New York, 1952. Christopher M. A. Brett and Ana Maria Oliveira Brett, Electroquímica: princípios, métodos e aplicações, Oxford: Oxford Univ. Press, 1993. J.O.M. Bockris, A.K.N. Reddy, and M. Gamboa-Aldeco, Modern Electrochemistry 2A: Eletrodoics, 2nd edition, Kluwer Academic and Plenum Publishers, New York, 2000. M.E. Orazem and B. Tribollet, Electrochemical Impedance Spectroscopy, John Wiley & Sons, New Jersey, 2008. R.G. Compton, C. Batchelor-Mcauley, and E. J. F. Dickinson, Understanding Voltammetry: Problems And Solutions, Imperial College Press, 2011. R.G. Compton, and C. E. Banks, Understanding Voltammetry (2nd Edition), Imperial College Press, 2010. R.G. Compton, and C. E. Banks, Understanding Voltammetry (Third Edition), World Scientific, 2018. Jean-Michel Savéant, and C. Costentin, Elements of Molecular and Biomolecular Electrochemistry: An Electrochemical Approach to Electron Transfer Chemistry, Wiley, 2019.
----------------------	--

Disciplina: QP224	QP224 - Quimiometria em Química Analítica
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina
Turma: A	Prof. Dr. Javier Erick Lobatón Villa (Coordenador) e Profa. Dra. Márcia Cristina Breitreitz
Créditos: 4	Vagas: mínimo 5 - máximo 20
Sala: IQ-10	quartas e quintas das 14 às 16h
Ementa:	Quimiometria: definições e aplicações; vetores e matrizes; reconhecimento de padrões e classificação; análise de componentes principais; resolução de curvas e misturas por análise de fatores; calibração multivariada por mínimos quadrados clássico (CLS) e inverso (ILS); regressão de componentes principais (PCR), mínimos quadrados parciais (PLS), calibração multivariada não linear; análise de dados de ordem superior; redes neurais; algoritmos genéticos.
Conteúdo Programático:	Quimiometria: definições e aplicações; Planejamento de experimentos (planejamento fatorial completo e fracionário, construção de modelos não lineares, análise de regressão); Vetores e matrizes; Reconhecimento de padrões, Análise de componentes principais (PCA), Métodos de classificação; Resolução de curvas e misturas (MCR); Calibração multivariada, Regressão de componentes principais (PCR), Mínimos quadrados parciais (PLS); Calibração multivariada não linear; Análise de dados de ordem superior; Aprendizagem de máquina (ANN, SVM).
Bibliografia:	Bibliografia: 1. R. E. Bruns, I., S. Scarminio, B. Barros Neto, "Como fazer experimentos: aplicações na ciência e na indústria", 4ª ed., Bookman, SP, 2010. 2. Box, G. E. P., Hunter, J. S., Hunter, W. G. "Statistics for Experimenters", John Wiley and Sons, New Jersey, 2005. 3. M. M. C. Ferreira, "Quimiometria: Conceitos, métodos e aplicações", Editora da Unicamp, Campinas, 2015. 4. R. G. Brereton, "Chemometrics—Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant", Wiley, Chichester, 2003. 5. D. L. Massart, B. G. M. Vandeginste, L. M. C. Buydens, S. de Jong, P. J. Lewi, J. Smeyers-Verbeke, "Handbook of Chemometrics and Qualimetrics: Part B", Elsevier, Amsterdam, 1998. 6. M. Otto, "Chemometrics -Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry", Wiley-VCH, Weinheim, 1999.

Disciplina: QP320	QP320 - Biotecnologia e Bioquímica Avançada
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina
Turma: A	Prof. Dr. Carlos Henrique Inacio Ramos (coordenador) e Profa. Dra. Ljubica Tasic
Créditos: 4	Vagas: mínimo 5 - máximo 20
Sala: SEG na IQ-03 e TER na IQ-01	segundas e terças das 9 às 11h
Ementa:	Bioética. Bioquímica celular. Bioinformática. DNA Recombinante. Enzimas. Biotecnologia.
Conteúdo Programático:	Bioética Fluxo da informação gênica Bioinformática básica Princípios em microbiologia Tecnologia do DNA recombinante Proteínas Enzimas Tópicos sobre metabolismo celular Princípios de cultivo de células Aplicações biotecnológicas
Bibliografia:	1. Voet, D.; Voet, J. G.; Pratt, C. W. Fundamentos de Bioquímica, Artmed, São Paulo, Artmed, 4a edição, 2013. 2. Alberts, B. e colaboradores; Molecular Biology of the Cell, 4th Ed., Galante Science 2002. 3. Lewin, B. e colaboradores. Genes IX, Jones and Bartlett Publishers, 2008. 4. Organizadores: Santos, F.; Kern, A. L.; Boeira. J. M.; Dellagostin, O. Bioprocessos e Biotecnologia, Freitas Bastos; 1a edição, 2022. Artigos Científicos e Ferramentas da Web.

Disciplina: QP417	QP417 - Tópicos Especiais em Química Analítica V
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina
Turma: Z	Profa. Dra. Alessandra Sussulini
Créditos: 2	Vagas: mínimo 5 - máximo 20
Sala: IQ-02	segundas das 10 às 12h (acompanha graduação)
Ementa:	"Ciências Ômicas Baseadas em Espectrometria de Massas" Introdução às ciências ômicas. Proteômica. Metabolômica. Lipidômica. Metalômica. Técnicas de espectrometria de massas empregadas. Aplicações multidisciplinares.
Conteúdo Programático:	Ciências ômicas e biologia de sistemas. Conceitos, fluxo de trabalho, técnicas de espectrometria de massas e aplicações da proteômica. Conceitos, fluxo de trabalho, técnicas de espectrometria de massas e aplicações da metabolômica e da lipidômica. Tratamento de dados metabolômicos e lipidômicos: análises estatísticas e bioinformáticas. Conceitos, fluxo de trabalho, técnicas de espectrometria de massas e aplicações da metalômica. Estratégias de imageamento molecular e elementar. Visão geral sobre integração de dados e multi-ômicas.
Bibliografia:	Bibliografia Básica 1) de Hoffmann E. Mass spectrometry: principles and applications. Coautoria de Vincent Stroobant. 3rd ed. Chichester: John Wiley & Sons; c2007. 2) Metabolomics: from fundamentals to clinical applications. Edição de Alessandra Sussulini. Cham: Springer; 2017. 3) Han X. Lipidomics: comprehensive mass spectrometry of lipids. Hoboken, NJ: Wiley; 2016. Bibliografia Complementar 1) Computational methods and data analysis for metabolomics. Edição de Shuzhao Li. New York, NY: Humana Press; c2020. 2) Metallomics: the science of biometals. Edição de Marco Aurelio Zezzi Arruda. Cham: Springer; 2018. 3) Separation techniques applied to omics sciences: from principles to relevant applications. Edição de Ana Valéria Colnaghi Simionato. Cham: Springer; 2021. 4) Statistical analysis of proteomics, metabolomics, and lipidomics data using mass spectrometry. Edição de Susmita Datta, Bart J. A. Mertens. Cham: Springer; c2017. 5) Omics approaches, technologies and applications: integrative approaches for understanding OMICS data. Edição de Preeti Arivaradarajan, Gauri Misra. Singapore: Springer; c2018.

Disciplina: QP423	QP423- Tópicos Especiais em Química Orgânica I
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina
Turma: Z	Profa. Dra. Wanda Pereira Almeida
Créditos: 4	Vagas: mínimo 3 - máximo 20
Sala: IQ-10	segundas e quartas das 16 às 18h
Ementa:	"Do composto bioativo ao medicamento" Processo de desenvolvimento de fármacos. Propriedades físico-químicas determinantes para a ação dos fármacos. Predição de propriedades. Fase Farmacocinética. Interações fármacoreceptor. Biotransformação. Métodos clássicos na Otimização de Protótipos. Métodos modernos na descoberta de fármacos
Conteúdo Programático:	<i>Introdução à Disciplina</i> O Processo de Desenvolvimento de fármacos Fase farmacocinética Propriedades físico-químicas e ação dos fármacos Predição de propriedades físico-químicas Biotransformação, estabilidade metabólica e Latênciação <i>Estágio 1</i> - Identificação de moléculas bioativas: serendipity, produtos naturais e desenvolvimento de fármacos - Abordagem fisiopatológica - Métodos clássicos utilizados na otimização de protótipos - Métodos Modernos na Descoberta de Fármacos - Validação de Alvos <i>Estágio 2: Estudos pré-clínicos</i> O que são? Importância e quando fazer A ferramenta HTS <i>Estágio 3: Estudos clínicos</i> - Requisitos para que um candidato a fármaco entre em fase clínica - Placebo e duplo cego - Estudos com voluntários e pacientes - O que são testes clínicos randomizados <i>Estágio 4</i> - Como um medicamento é aprovado? - Importância da Farmacovigilância - Retirada de mercado
Bibliografia:	Além de artigos científicos indicados: Bibliografia Básica FERREIRA, E. I.; BARREIRO, E. J.; PARISE-FILHO, R.; GIAROLLA, J. Fundamentos de Química Farmacêutica Medicinal. 1ª. Edição, Manole, 2022. WILLIAMS, D. A.; ZITO, S. W.; LEMKE, T. L.; ROCHE, V. F. Foye's Principles of Medicinal Chemistry. 7. ed. Philadelphia: Lippincott Williams & Wilkins, 2013. (Edição equivalente: 6). SILVERMAN, R. B.; HOLLADAY, M. W. The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action. 3. ed. Cambridge: Academic Press, 2014. (Edição equivalente: 2). Bibliografia Complementar HARROLD, M.; ZAVOD, R. Basic Concepts in Medicinal Chemistry. 1 ed. Bethesda: American Society of Health-System Pharmacists, 2013. KERN, E. H.; LI, D. Drug-like Properties: Concepts, Structure Design and Methods, 1st Edition. 1. ed. Cambridge: Academic Press, 2008.

Disciplina: QP427	QP427 - Tópicos Especiais em Química Analítica V (Special Topics in Organic Chemistry V)
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina
Turma: Z	Profa. Dra. Ljubica Tasic
Créditos: 2	Vagas: mínimo 4 - máximo 20
Sala: IQ-02	sextas das 8 às 10h (acompanha graduação - DISCIPLINA MINISTRADA EM INGLÊS)
Ementa:	"Fundamentos do aprendizado de máquina" ("Machine Learning Fundamentals") Introdução ao aprendizado de máquina, aprendizado supervisionado, aprendizado não supervisionado, aprendizado por reforço, redes neurais, árvores de decisão, máquinas de vetores de suporte, algoritmos de agrupamento, técnicas de redução de dimensionalidade, compensação de viés-variância, métricas de avaliação e aplicações práticas de aprendizado de máquina.
Conteúdo Programático:	Python for Data Science in Chemistry and Biochemistry. Introduction to Machine Learning. Supervised Learning. Unsupervised Learning. Reinforcement Learning. Neural Networks. Decision Trees. Support Vector Machines. Clustering Algorithms. Dimensionality Reduction Techniques. Bias-Variance Tradeoff. Evaluation Metrics. Practical Applications of Machine Learning in Chemistry and Biochemistry.
Bibliografia:	Bibliografia Básica 1) Bishop, C.M., Pattern Recognition and Machine Learning, Springer (2006) 2) Goodfellow, I., Bengio, Y., Courville, A., Deep Learning, MIT Press (2016) 3) Murphy, K.P., Machine Learning: A Probabilistic Perspective, MIT Press (2012) Bibliografia Complementar 1) Hastie, T., Tibshirani, R., Friedman, J., The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference and Prediction, Springer (2009) 2) Duda, R.O., Hart, P.E., Stork D.G., Pattern Classification, Wiley-Interscience (2000) 3) Russell S.J., Norvig P., Artificial Intelligence: A Modern Approach, Pearson (2015) 4) Material disponibilizado pelo professor

Disciplina: QP447	QP447 - Tópicos Especiais em Química Inorgânica V
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina
Turma: Z	Prof. Dr. André Luiz Barboza Formiga
Créditos: 2	Vagas: mínimo 5 - máximo 40
Sala: CB08	quintas das 8 às 10h (acompanha graduação)
Ementa:	"Soft Skills: mercado de trabalho e gestão de carreira" Soft skills, conceitos e definições. Importância na gestão da carreira e no mercado de trabalho. Desenvolvimento pessoal.
Conteúdo Programático:	1. Hard vs. Soft skills. 2. Gestão do tempo e autogerenciamento 3. Pensamento crítico, argumentação e comunicação efetiva. 4. Resolução de problemas complexos. 5. Mapas conceituais e mapas mentais. 6. Tomada de decisão. 7. Liderança e trabalho em equipe. 8. Armadilhas e estratégias de carreiras.
Bibliografia:	Bibliografia Básica Dutra, Joel Souza. Gestão de carreiras : a pessoa, a organização e as oportunidades. 2. ed. Rio de Janeiro: Atlas, 2017. e-book Martins, Jose Carlos Cordeiro Soft skills: conheça as ferramentas para você adquirir, consolidar e compartilhar conhecimentos. Brasport, 2023. e-book Pablo Bes et al. Soft skills. Porto Alegre: Sagah, 2021. e-book Bibliografia Complementar / Avançada Textos fornecidos pelo professor.

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

Disciplina: QP464	QP464 - Tópicos Especiais em Química Interdisciplinar II
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
Turma: Z	Prof. Dr. Pablo Sebastian Fernandez
Créditos: 2	Vagas: mínimo 1 - máximo 5
Sala: PB-16	quartas das 19 às 21h (acompanha graduação)
Ementa:	"Propriedade Intelectual, Inovação e Empreendedorismo" Introdução à propriedade intelectual. Patentes. Licenciamento de tecnologia. Empresas spin-off/startups. Estudo de mercado. Marketing e validação. Mentorias. Elaboração de modelo de negócios. Pitch deck
Conteúdo Programático:	1. A atuação da Unicamp na área de empreendedorismo. 2. A propriedade intelectual nas Universidade e Empresas. Tipos de Inovação e a importância da propriedade intelectual. Tipos de patentes e as características de uma invenção patenteável. 3. Empreendedor: o pensamento, o comportamento, as atitudes e os objetivos. A importâncias das ideias e as estratégias. O poder da negociação e a venda. 4. Startups/spin off. A Startup Enxuta e o modelo de negócios. A criação do modelo. A realização de entrevistas para validação do modelo. Erros mais comuns durante o processo. 5. Inovação pensando nas necessidades das pessoas. Etapas do processo de Inovação para a criação de um produto/serviço. 6. Investimentos em startups no Brasil e no mundo. Acesso a capital. Processo de seleção de empresas por investidores. 7. A composição de equipes. Seleção de empreendedores. A cultura empreendedora. O plano de carreira. A remuneração dos funcionários. 8. O pitch. Tipos e objetivos. Estrutura e exemplos de pitches. Erros comuns. 9. O mercado. O modelo escalável. Fatores mais importante para o sucesso (e falha) das startups. O crescimento de uma empresa. Objetivo da disciplina: Intensificar o relacionamento da universidade com as instituições (empresas e organizações) através do canal dos temas propostos, tratados por especialistas e profissionais convidados, no contexto das atividades de ensino e pesquisa da universidade. Oferecer um panorama de temas contemporâneos relacionada a propriedade intelectual, inovação e empreendedorismo, no contexto da produção científica e tecnológica da Unicamp. Contribuir para a complementação da grade de disciplinas existentes e relacionadas aos temas, através de palestras, atividades práticas e discussões estruturadas abertas à comunidade. Palestrantes: especialistas e profissionais convidados.
Bibliografia:	Bibliografia Básica OSTERWALDER, A. e cols. Value Proposition Design: Como construir propostas de valor inovadoras: Alta Books; 1ª edição (1 março 2019) ERIC RIES. A startup enxuta: Como usar a inovação contínua para criar negócios radicalmente bem-sucedidos. Editora Sextante; 1ª edição (25 outubro 2019) OSTERWALDER, A; PIGNEUR, YVES. Business Model Generation: Inovação Em Modelos De Negócios. Alta Books; 1ª edição (26 julho 2011) Bibliografia Complementar / Avançada

Disciplina: QP465	QP465 - Tópicos Especiais em Química Interdisciplinar III
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina.
Turma: Z	Prof. Dr. Rodrigo Antonio Cormanich
Créditos: 1	Vagas: mínimo 1 - máximo 60
Sala: IQ-03	quartas das 9 às 10h
Observação: A disciplina é destinada <u>somente</u> aos alunos <u>ingressantes na Pós-Graduação do IQ no 1º semestre de 2024</u>	
Ementa:	"Apresentação e discussão de temas importantes e atuais para a formação dos alunos do Programa Pós Graduação em Química da Unicamp." Temas como: segurança nos laboratórios de pesquisa, ética, integridade em pesquisa, biossegurança e patrimônio genético, tratamento de dados e redação de documentos científicos. Também serão abordados aspectos de saúde psico social, empreendedorismo, patentes e outros relacionados à experiências pessoal e profissional.
Conteúdo Programático:	Apresentação do PPG-Química da UNICAMP. Palestra obrigatória de Segurança. Serviço de Assistência Psicológica e Psiquiátrica ao Estudante. Integridade da educação e da pesquisa/Uso de software de verificação de similaridade. Comissão Interna de Biossegurança. Patrimônio Genético. Planejamento de dados. Comitê de Ética em Pesquisa. Redação de documentos científicos. Tratamento de Dados. Empreendedorismo/Patentes. Internacionalização. Extensão no IQ. Pesquisa no IQ.

Disciplina: QP648	QP648 - Tópicos Especiais em Química Inorgânica VI
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina
Turma: Z	Prof. Dr. Wdeson Pereira Barros
Créditos: 2	Vagas: mínimo 5 - máximo 20
Sala: IQ-04	quartas das 10 às 12h
Ementa:	"Introdução a Cristalografia Estrutural" Cristais e estruturas cristalinas. Reticulos cristalinos e simetria espacial. Sistemas cristalinos. Cristalografia estrutural: difração em monocristais. Tabela Internacional de Cristalografia. Introdução à determinação e refinamento de estruturas cristalinas.
Conteúdo Programático:	- Reticulos cristalinos e o experimento de difração; espaço recíproco e fatores de estrutura. - Simetria cristalina; simetria envolvendo a translação; sistemas cristalinos e grupos espaciais. - Métodos experimentais: processos e métodos de cristalização; coleta de dados por difração de raios X de monocristais. - Métodos de solução e refinamento de estruturas; métodos de Patterson e diretos; método dos mínimos quadrados. Desordem. Dispersão anômala. - Bancos de dados cristalográficos. - Representação de estruturas de monocristais. - Validação de estruturas de monocristais a partir do arquivo CIF.
Bibliografia:	Bibliografia Básica 1) Hammond, C. The basics of crystallography and diffraction. 3rd ed. Oxford, N.Y.: Oxford University Press, 2009. 432p. 2) Massa, W. Crystal structure determination. 2nd ed. Berlin: Springer, 2004. 210p. 3) Clegg, W. Crystal structure determination. Oxford: Oxford University Press, 1998. 84p. Bibliografia Complementar / Avançada 1) Clegg, W. (Ed.). Crystal structure analysis: principles and practice. 2nd ed. Oxford, N.Y.: Oxford University Press, 2009. 387p 2) Glusker, J. P. Crystal structure analysis for chemists and biologists. New York, N.Y.: VCH, 1994. 854p. 3) Pecharsky, V. K. Fundamentals of powder diffraction and structural characterization of materials. 2nd ed. New York: Springer, 2009. 741p. 4) Ladd, M. F. C. Structure determination by X-ray crystallography. 4th ed. New York, NY: Kluwer/Plenum, 2003. 819p. 5) Rissanen, K. Advanced X-Ray Crystallography. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2012. (Topics in Current Chemistry; 315). E-book. 6) Artigos selecionados pelo docente

Disciplina: QP741	QP741 - Tópicos Especiais em Físico-Química XV
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina
Turma: Z	Prof. Dr. Nelson Henrique Morgon (coordenador) e René Nome Silva
Créditos: 2	Vagas: mínimo 3 - máximo 25
Sala: IQ-03	quartas das 14 às 16h (acompanha graduação)
Ementa:	"Introdução à Computação Quântica Aplicada à Química" Introdução à Computação Quântica, Revisão de Química Quântica, Ambientes de programação em computação quântica, VQE e Aplicações em átomos e moléculas diatômicas.
Conteúdo Programático:	Introdução à Computação Quântica: Aspectos Históricos, conceitos fundamentais, tipos. Introdução (Revisão) à Química Quântica e Computacional. Ferramentas: Python, Ambiente Jupiter, QISKIT. ... Instalação de Programas, Definição de ambientes de trabalho. Espectroscopia RMN (Esfera de Bloch), Eletrônica (UV/Vis), e Resolvida no Tempo. Métodos teóricos: Variacional, Perturbativo, HF e Coupled Cluster. Álgebra Linear: Expansão em Base, Transformação Unitária, Vetor, Tensor, Produto Interno visando introdução a GATES. Interferência, Coerência, Enlaçamento (Emaranhamento) e Sobreposição. GATES (X, Y, Z, NOT, CNOT, AND, Hadamard,) Erros, Ruídos associados ao computador quânticos, ... definições e métodos mitigação. Construção de curva de energia potencial para moléculas diatômicas (HLi, HF, F2, ...) usando pacotes de estrutura eletrônica. Atividades práticas: Construção de circuitos quânticos, geração e análise de outputs, gráficos, esfera de Bloch, operações xyz em esfera de Bloch, ... Variational Quantum Eigensolver (VQE) Construção de curva de energia potencial para moléculas diatômicas (H2 e HLi, He2, ...) usando pacotes de estrutura eletrônica em ambiente de simuladores de computadores quânticos. Avaliação Final – Salvar o Notebook (Ambiente do Jupiter)
Bibliografia:	Bibliografia Básica: Nenhuma bibliografia específica, mas textos que contemplem Computação Quântica, Aplicações em Química, Métodos de Estrutura Eletrônica e de Simulação Molecular, Programação em Python. Bibliografia Complementar / Avançada: Material para consulta será fornecido durante as aulas.

Disciplina: QP742	QP742 - Tópicos Especiais em Físico-Química XVI
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina
Turma: Z	Prof. Dr. Fernando Galembeck
Créditos: 2	Vagas: mínimo 5 - máximo 20
Sala: IQ-03	terças das 16 às 18h (acompanha graduação)
Ementa:	"Uma nova Química : sistemas naturalmente eletrizados" A quebra do paradigma da eletroneutralidade. A pervasiva eletrificação do meio ambiente. Água é o principal agente da eletrificação do ambiente. Termodinâmica Química em ambientes auto-eletrificados. Efeitos da eletrificação: mudança a espontaneidade de reações químicas, na cinética de transições de fase, no hábito de cristais e na morfologia de líquidos e vidros, Aplicações em produção química, em produção de energia e em tecnologias de materiais. Importância para os ODS e para a Economia Circular.
Conteúdo Programático:	Nosso ambiente eletrizado. Eletroneutralidade ou não-eletroneutralidade? O efeito Maxwell-Wagner-Sillars. Eletrização pela água, higroeletricidade e efeitos hidrovoltáicos. Termodinâmica dos sistemas não eletroneutros. Reações químicas "On-water". Transições de fase. Aplicações.
Bibliografia:	Bibliografia Básica F. Galembeck e T. A. L. Burgo, Chemical Electrostatics, Springer, Cham, 2017. Bibliografia Complementar / Avançada Artigos em periódicos informados pelo professor.

Disciplina: QP832	QP832 - Tópicos Especiais em Físico-Química VIII
Pré-Requisitos:	(AA200) ou (QP124) ou (QP125)
Turma: Z	Profa. Dra. Márcia Miguel Castro Ferreira
Créditos: 4	Vagas: mínimo 5 - máximo 20
Sala: SEG no LIFE e QUA na IQ-02	segundas e quartas das 16 às 18h
Ementa:	"Quimiometria - Análise Multivariada de Dados Experimentais em Química"
Conteúdo Programático:	1. Análise Multivariada: - Introdução - Preparação dos dados para análise 2. Análise Exploratória dos dados : - PCA Análise de Componentes Principais - HCA Análise Hierárquica de Agrupamentos 3. Construção de modelos de Calibração: - PCR Regressão por Componentes Principais - PLS Regressão por Mínimos Quadrados Parciais 4. Construção de modelos de Classificação (Reconhecimento de Padrões): - KNN - SIMCA 5. Aplicações de acordo com o interesse dos alunos
Bibliografia:	Bibliografia Básica -QUIMIOMETRIA: CONCEITOS, MÉTODOS E APLICAÇÕES - Márcia M C Ferreira; Editora da Unicamp (2015). - Brereton, R.G. Chemometrics. Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant, Wiley, Chichester, 2003. - Massart, D.L.; Vandeginste, B.G.M.; Buydens, L.M.C.; Jong, S. DE; Lewi, P.J. e Smeyers-Verbeke, J. Handbook of Chemometrics and Qualimetrics: Part A e Part B ; Data Handling In Science and Technology, Volumes 20A e 20B, Elsevier, Amsterdam, 1997. Bibliografia Complementar / Avançada

Disciplina: QP935	QP935 - Tópicos Especiais em Físico-Química XI
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina
Turma: Z	Prof. Dr. João Batista Souza Junior
Créditos: 4	Vagas: mínimo 3 - máximo 30
Sala: IQ-03	quartas e sextas das 10 às 12h
Ementa:	"Caracterização Estrutural Avançada de Nanomateriais" Este curso abordará as principais técnicas avançadas de caracterização microestrutural de materiais. Os princípios básicos das técnicas de difração de raios X, difração de elétrons e Microscopia Eletrônica de Transmissão (TEM). Introdução a Cristalografia, identificação de fases por Difração de Raios X (XRD) e refinamento de fases pelo Método de Rietveld. Análise e tratamento de dados de padrões de difração de elétrons de sistemas amorfos, policristalinos e monocristais. Análise e tratamento de dados de imagens de baixa magnificação em TEM, alta resolução (HRTEM), varredura (STEM) e mapeamento químico. Indexação cristalográfica de imagens de HRTEM e sua correlação com difração de elétrons. Principais softwares de tratamento de dados de difração de raios X, difração de elétrons e Microscopia Eletrônica de Transmissão (TEM).
Conteúdo Programático:	(1) Definição de estrutura cristalográfica, microestrutura e defeitos em materiais. (2) Introdução a cristalografia, sistemas cristalinos, notações e rede de Bravais. (3) Índices de Miller, planos e direções cristalográficas, sítios octaédricos e tetraédricos etc. (4) Difração de raios X, espalhamento de raios X, leis de Bragg, A rede recíproca, relação recíproca, lei de Bragg, espaço recíproco, esfera de Ewald e esfera de reflexão. (5) Estratégias de coleta de dados de Difração de Raios X, fator de estrutura, interpretação de dados de intensidade, refinamento de Rietveld (TOPAS Bruker). (6) Introdução a Microscopia Eletrônica de Transmissão (TEM), difração de elétrons e formação de imagem. (7) Contraste de massa-espessura, difração e número atômico e os métodos de aquisição TEM, HRTEM, STEM etc. (8) Tratamento de dados de difração de elétrons, indexação de sistemas amorfos, policristalinos e monocristais. (9) Tratamento de dados de HRTEM e indexação das direções cristalográficas. (10) Tratamento de dados de STEM, mapeamento químico e novas técnicas avançadas em TEM. (11) Correlação de técnicas avançadas de caracterização estrutural e softwares de tratamento de dados.
Bibliografia:	Bibliografia Básica 1. CULLITY, B. D.; GRAHAM, C. D. Introduction to Magnetic Materials. Hoboken: John Wiley & Sons, 2009. 544 p. 2. D. B. Williams and C. B. Carter. Transmission Electron Microscopy: A Textbook for Materials Science. Springer, 2009. 3. DINNEBIER, R. E.; BILLINGE, S. J. L. Powder Diffraction: Theory and Practice. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2008. 582 p. 4. WARREN, B. E. X-ray Diffraction. Courier Corporation, 1990. 981 p. Bibliografia Complementar / Avançada

Disciplina: QP936	QP936 - Tópicos Especiais em Físico-Química XII
Pré-Requisitos:	Não há pré-requisitos para essa disciplina
Turma: Z	Prof. Dr. Adalberto Bono Maurizio Sacchi Bassi
Créditos: 4	Vagas: mínimo 3 - máximo 10
Sala: IQ-10	segundas e quartas das 10 às 12h
Ementa:	"Termodinâmica Química Temporal I" Conceitos fundamentais. Primeira lei. Segunda lei. Termodinâmica e cinética química. Transições entre estados de agregação.
Conteúdo Programático:	1. Sistema, propriedade e processo 2. Propriedade extensiva e intensiva 3. Equação diferencial 4. Condição homogênea 5. Condição estacionária 6. Condição de equilíbrio 7. Teorias temporal e atemporal 8. Fronteiras especiais 9. Conteúdos e trocas de energia 10. Primeira lei da termodinâmica para sistema fechado (SF) 11. Entalpia 12. Segunda lei da termodinâmica para SF sob processo homogêneo 13. Homogeneidade de potencial químico, térmica e bária (processo TμP-h) 14. Capacidades térmicas 15. Propriedade parcial molar 16. Desigualdades diferenciais para SF sob processo TμP-h 17. Desigualdades integrais para SF sob processo TμP-h 18. Segunda lei da termodinâmica para SF sob processo TμP-h 19. Primeiros conceitos de termodinâmica e cinética químicas 20. Processo químico suave 21. Processo químico cinético 22. Dependência térmica da constante de reação 23. Reação química elementar 24. Decomposição da afinidade química 25. Reação química em solução gasosa perfeita e líquida diluída 26. Regra de fases 27. Diagramas para única espécie química 28. Diagramas para soluções binárias: líquida ideal e gasosa perfeita 29. Diagramas para soluções binárias: líquida não ideal e gasosa
Bibliografia:	Bibliografia Básica 1. Bassi, A. B. M. S., Conceitos Fundamentais de Termodinâmica e Cinética para Reações Químicas, Editora da UNICAMP (2021). Bibliografia Complementar / Avançada 1. 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). 2. McQuarrie, Donald A.; Simon John D., Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books (2016).