

DISCIPLINAS

Todas as disciplinas serão oferecidas anualmente, de acordo com a oferta normal das Instituições Nucleadoras, as quais já possuem programas de pós-graduação em Química, como também das Instituições Associadas que podem oferecer disciplinas em função da demanda dos alunos inseridos no PPGMQ.

QUÍMICA ORGÂNICA AVANÇADA I

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60

Créditos: 4

EMENTA:

1- Estudar os Principais Grupos de Reações Usadas em Síntese Orgânica, tais como:

- Substituição, Adição e Eliminação
- Formação de Ligações Carbono-Carbono;
- Reações de Oxidação e Redução.

2- Estudar Conformação e Estereoquímica.

BIBLIOGRAFIA:

- 1- F. A. CAREY, R.J. SUNDBERG, ADVANCED ORGANIC CHEMISTRY, PLENUM PRESS, USA, 4ª ED, 2004.
- 2- J. MARCH, ADVANCED ORGANIC CHEMISTRY: REACTIONS, MECHANIS AND STRUCTURE, 6ª ED., MCGRAW-HILL, USA, 2007.

QUÍMICA INORGÂNICA AVANÇADA I

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60

Créditos: 4

EMENTA:

1- Química de coordenação: T. L. V, T. C. C., T. O. M.

2- Estruturas e números de coordenação.

3- Isomerismo, reações, cinética e mecanismo.

4- Conceitos modernos de ácidos e bases

BIBLIOGRAFIA:

1- HUHEEY, J.E., KEITER, E.A., KEITER, R.L., INORGANIC CHEMISTRY PRINCIPLES OF STRUCTURE AND REACTIVITY, 4 ED, HARPER

COLLINS COLEGE PUBLISHERS, USA, 1993.

2-F A COTTON, G WILKINSON, C A MURILLO, M BOCHMANN, ADVANCED ORGANIC CHEMISTRY, 6 ED, WILEY, 1999.

3-C E HOUSECROFT, A G SHARPE, INORGANIC CHEMISTRY, 3 ED, PEARSON, ENGLAND, 2008.

BIOINORGÂNICA

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

1- O Uso de Complexos Metálicos na Medicina

2- Utilização dos Compostos de Coordenação na Quimioterapia do Câncer, como Agentes Antiparasitários e no Tratamento de Artrite

3- Novas Perspectivas do Uso de Complexos Metálicos em Medicina

4- Íons Metálicos Constituintes de Proteínas, Enzimas e Outras Biomoléculas

BIBLIOGRAFIA:

1- N.FARREL,TRANSITION METAL COMPLEXES AS DRUGS AND CHEMOTHERAPEUTIC AGENTS, HUMAN PRESS,ENGLAND, 2000.

2- S. J. LIPPARD, J.M.BERG,PRINCIPLES OF BIOINORGANIC CHEMISTRY, UNIVERSITY SCIENCE BOOKS,USA,1994.

3-I Bertini, H B Gray, E I Stiefel, J S Valentine Biological Inorganic Chemistry, University Science Book, USA, 2007

4-W Kam, B Schwederski, Bioinorganic Chemistry, Wiley, USA, 2005

ESPECTROSCOPIA MOLECULAR

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Introdução à espectroscopia vibracional: oscilador harmônico e anarmônico, energias clássica e quântica, modelos de vibração no infravermelho e Raman; Espectroscopia rotacional e rotovibracional; Introdução à teoria de grupos; Resolução da vibração molecular: campo de força e análise de coordenadas normais; Trabalho experimental de cálculo de coordenadas normais para sistemas químicos simples; Efeito Raman: modelo quântico de espalhamento de luz, efeitos especiais: Raman ressonante e intensificação de sinal por efeito de superfície.

BIBLIOGRAFIA:

- 1- R AROCA, SURFACE-ENHANCED VIBRATIONAL SPECTROSCOPY, 1 ED, WILEY, ENGLAND, 2006
- 2- J R FERRARO, K NAKAMOTO, C W BROWN, INTRODUCTORY RAMAN SPECTROSCOPY, 2 ED, ELSEVIER, ENGLAND, 2003.
- 3- D A LONG, THE RAMAN EFFECT, I ED, WILEY, ENGLAND, 2002.

FÍSICO-QUÍMICA AVANÇADA I

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

- 1- Conceitos de trabalho e calor.
- 2- A 1ª lei da termodinâmica e suas implicações e aplicações.
- 3- 2ª e 3ª leis da termodinâmica (o conceito de entropia).
- 4- Definição de energia livre.
- 5- Equilíbrio químico.
- 6- Equilíbrio de fases.
- 7- Termodinâmica de soluções.
- 8- Aspectos gerais sobre cinética-química.

BIBLIOGRAFIA:

- 1- P. W. ATKINS, FÍSICO-QUÍMICA, 6ª ED., VOLS. 1, 2 E 3. LTC. BRASIL. 1999.
- 2- G. CASTELLAN, FUNDAMENTOS DE FÍSICO-QUÍMICA, LTC. BRASIL. 1989.

3- D A McQUARRIE, J D SIMON, PHYSICAL CHEMISTRY, A MOLECULAR APPROACH, UNIVERSITY SCIENCES BOOK, USA, 1997

MÉTODOS FÍSICOS DA ANÁLISE

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

1- Espectroscopia no Infravermelho.

2- Espectroscopia no Ultravioleta.

3- Ressonância Magnética Nuclear.

4- Espectrometria de massas.

BIBLIOGRAFIA:

1- CLARIDGE, T.D.W., HIGH-RESOLUTION NMR TECHNIQUES IN ORGANIC CHEMISTRY. Elsevier, UK, 2005

2- WILLIAMS, D.H., FLEMING, M.A., SPECTROSCOPIC METHODS IN ORGANIC CHEMISTRY, 2ª ED. MCGRAW-HILL. ENGLAND, 1973.

3- SILVERSTEIN, R.M., BASSLER, G.S., MORRIL, T.C., IDENTIFICAÇÃO ESPECTROMÉTRICA DE COMPOSTOS ORGÂNICOS. 7ª ED. LTC, 2007.

4- J T WATSON, O D SPARKMAN, INTRODUCTION TO MASS SPECTROMETRY, 4 ED, WILEY, 2007

5- BARROW, G.M., INTRODUCTION TO MOLECULAR SPECTROSCOPY. MC GRAW-HILL INTERNATIONAL EDITIONS. USA, 1962.

6- KETTLE, S.F.A., PHYSICAL INORGANIC CHEMISTRY. EPEKTRUM. USA, 1996

MÉTODOS DE SEPARAÇÃO

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

- 1- Estudar as principais técnicas cromatográficas enfatizando os conceitos, além de estudar os equipamentos existentes para obtenção de uma melhor performance analítica.
- 2- Verificação das diversas aplicações.

BIBLIOGRAFIA:

- 1- Z.B. ALFASSI, C.M.WAI, PRECONCENTRATION TECHNIQUES FOR TRACE ELEMENTS, 1ªED., CRC PRESS INC., 1992.
- 2- K. ROBARDS, P.R. HADDAD, P.E. JACKSO, PRINCIPLES AND PRACTICE OF MODERN CHROMATOGRAPHIC METHODS, 2ªED., EDITORA ACADEMIC PRESS, ENGLAND, 1997.
- 3- L.R. SNYDER, J.J. KIRKLAND, INTRODUCTION TO MODERN LIQUID CHROMATOGRAPHY, 2ª ED., JOHN WILEY & SONS, USA, 1979.
- 4- R.L. GROB, ¿MODERN PRACTICE OF GAS CHROMATOGRAPHY¿, 3ª ED., EDITORA JOHN WILEY & SONS, USA, 1995.
- 5- H. SHINTAN, J. POLONSKY, ¿HANDBOOK OF CAPILLARY ELECTROPHORESIS APLICACIONES¿, BLACKIE ACADEMIC & PROFESSIONAL, UK, 1997.

QUÍMICA QUÂNTICA

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

- 1- Desenvolvimento da mecânica quântica.
- 2- A equação de Schrödinger.
- 3- A solução da equação de Schrödinger para a partícula na caixa.
- 4- O conceito de operadores e valores esperados.
- 5- Teoremas da mecânica quântica.
- 6- O método variacional.
- 7- Solução da equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio.
- 8- O princípio de Pauli e o spin eletrônico.
- 9- Átomos multieletrônicos.
- 10- Estrutura eletrônica de moléculas.

BIBLIOGRAFIA:

- 1- I. N. LEVINE. QUANTUM CHEMISTRY. 4TH EDITION, PRENTICE-HALL INTERNATIONAL, INC., USA, 1991.
- 2- P. W. ATKINS. MOLECULAR QUANTUM MECHANICS. OXFORD UNIVERSITY PRESS, ENGLAND, 1983.
- 3- ARTIGOS ESPECÍFICOS SOBRE APLICAÇÕES DA QUÍMICA QUÂNTICA.

SÍNTESE ORGÂNICA

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

1- Revisão de funcionalização, interconversão de grupos funcionais e principais reações em química orgânica;

2- Retrossíntese e metodologia em síntese orgânica.

3- Síntese de moléculas simples e complexas.

BIBLIOGRAFIA:

1-R C Larock, Comprehensive Organic Transformations, 2ª ED., Wiley, USA, 1999.

2- J. MARCH, ADVANCED ORGANIC CHEMISTRY: REACTIONS, MECHANIS AND STRUCTURE, 6ª ED., MCGRAW-HILL, USA, 2007.

3-P G M WURTS, T W Greene, Protecting Groups, 4ª ED., Wiley, USA, 2007.

4-J Clayden, N Greeves, S Warren, P Wothers, Organic Chemistry, 2 Ed , Oxford Press, 2008

5-M B Smith, Organic Synthesis, 2ª ED., MCGRAW-HILL, USA, 2002.

Página 18/180 - 05/05/2013 18:27:03

6-K C Nicolaou, E J sorensen, Classics in Total Synthesis, 1ª ED, VCH, 1996

7-6-K C Nicolaou, S A Snyder, Classics in Total Synthesis II, 1ª ED, Wiley-VCH, 2003

QUÍMICA ANALÍTICA AVANÇADA I

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

- 1- Estudar os principais parâmetros estatísticos usados em química analítica.
- 2- Derivar curvas de *Titulação* e estudar o equilíbrio envolvido em cada uma das titulometrias.
- 3- Estudar os diversos métodos de abertura de amostras orgânicas e inorgânicas.
- 4- Introduzir fundamentos da técnica de espectrofotometria na região do uv/vis.

BIBLIOGRAFIA:

- 1- Skoog, D. A; Holler, F. J.; Nieman, T. A. Princípios de Análise Instrumental, 5ª ed. Porto Alegre: Bookman, 2006.
- 2- Skoog, D. A; Fundamentos de Química Analítica, São Paulo: Cengage, 2005.
- 3- Harris, D.C. Análise Química Quantitativa, 7ª ed, Rio de Janeiro: LTC, 2008.

MÉTODOS DE SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE LÍQUIDOS

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

- 1- Introdução à Simulação Computacional
- 2- Mecânica Estatística
- 3- Dinâmica Molecular
- 4- Métodos de Montecarlo
- 5- Análise de Resultados na Estrutura Líquida

BIBLIOGRAFIA:

1- M.P.ALLEN, D.J.TILDESLEY. COMPUTER SIMULATION OF LIQUIDS. OXFORD SCIENCE PUBLICATIONS,1997.

2-F JENSEN, INTRODUCTION TO COMPUTATIONAL CHEMISTRY, WILEY, ENGLAND, 2002.

TÓPICOS EM QUÍMICA I

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 30 h

Créditos: 2

EMENTA:

Varia de acordo com interesses específicos de projetos de pesquisa em desenvolvimento junto ao Programa de Pós-Graduação em Química (Mestrado e Doutorado).

BIBLIOGRAFIA:

Variada

MÉTODOS ELETROQUÍMICOS DE ANÁLISE

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Nesta disciplina se prevê o estudo de diferentes métodos eletroanalíticos, demonstrando as suas potencialidades quanto à técnica de análise

para diferentes analitos. Serão abordados aspectos teóricos e práticos de cada uma das técnicas mencionadas no programa. O uso de sistemas

de análise por injeção em fluxo associados aos métodos de detecção eletroanalíticas serão introduzidos.

BIBLIOGRAFIA:

1- A.J. BARD E L.R. FAULKNER, ELECTROCHEMICAL METHODS: FUNDAMNETALS AND APPLICATIONS. JOHN WILEY & SONS, 2001.

2- M. A. C. BRETT E A. M .O. BRETT. ELETROCHEMISTRY: PRINCIPLES, METHODS AND APPLICATIONS, OXFORD NEW YORK: OXFORD UNIVERSITY PRESS, 1993.

3- J. HEYROWSKY E J. KUTA, PRINCIPLES OF POLAROGRAPHY. ACADEMIC PRESS, 1966.

4- T. RILEY, C.TOMLINSON E A.M. JAMES, PRINCIPLES OF ELECTROANALYTICAL METHODS (ANALYTICAL CHEMISTRY BY OPEN LEARNING). JOHN WILEY & SONS, 1987.

CRISTALOGRAFIA ESTRUTURAL

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

1- Simetria no Estado Sólido.

2- Difração de Raios-X.

3- Determinação de Estrutura Cristalina.

4- Programas de Resolução, Refinamento e Desenho de Estruturas Cristalinas.

BIBLIOGRAFIA:

1- M.F.C. LADD and R.A. PALMER, STRUCTURE DETERMINATION BY X-RAY CRYSTALLOGRAPHY. PLENUM PRESS - 3TH EDITION, 1994.

2- M. WOOLFSON, AN INTRODUCTION TO X-RAY CRYSTALLOGRAPHY. CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS - 2TH EDITION, 1997.

PLANEJAMENTO, OTIMIZAÇÃO E ANÁLISES DE EXPERIMENTOS

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60

Créditos: 4

Ementa:

Conceitos básicos. Princípios básicos da experimentação. Planejamento de experimentos. O papel da estatística na experimentação; a análise de variância; os delineamentos básicos: inteiramente ao acaso, blocos completos casualizados e quadrados latinos; experimentos fatoriais; experimentos em parcelas subdivididas; grupos de experimentos; modelos em classificação hierárquica; regressão linear múltipla; tópicos em experimentação. Uso de programas computacionais para análise estatística.

BIBLIOGRAFIA:

1. Como Fazer Experimentos, Benício de Barros Neto, Ieda Spacino Scarminio, Roy Edward Bruns. Editora Unicamp, 2007.

2. Planejamento de Experimentos e Otimização de Processos - Uma Estratégia Sequencial de Planejamentos, Maria Izabel Rodrigues e Antônio Francisco Lemma. Editora Casa do Pão, 2005.

3. Estatística Aplicada e Probabilidade Para Engenheiros, Douglas C. Montgomery, George C. Runger, Editora LTC, segunda edição.

4. Quimiometria II: Planilhas Eletrônicas para Cálculos de Planejamentos Experimentais, Um Tutorial, Reinaldo F. Teófilo e Márcia M. C. Ferreira, Química. Nova, Vol. 29, No. 2, 338-350, 2006.

TERMODINÂMICA ESTATÍSTICA

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Revisar conceitos clássicos de entropia estatística e teoria cinética dos gases e obter a distribuição de velocidades de Maxwell; Conceituar a distribuição de Boltzmann em um sistema molecular e um ensemble de sistemas; Associar a função de partição com propriedades termodinâmicas: capacidade calorífica, entropia, entalpia, energia interna e energia de Gibbs; Estimar energias de transição translacional, rotacional, vibracional e eletrônica a partir de dados espectroscópicos e correlacionar com a distribuição de energia de Boltzmann.

BIBLIOGRAFIA:

- 1 - Castellan, Fund. Físico-Química, 2001.
- 2 - Eisberg e Lerner, Física, Fund. Apl., vol.2, Eisberg e Lerner ,1981.
- 3 - Eisberg e Resnick, Física Quântica.
- 4 - Entropy, Conceptual Disorder, J. Chem. Educ., 1988, 65(5), 403.
- 5 – H. B. Callen, Thermodynamics and an introduction to thermostatistics, 2 Ed, wiley, 1985

QUÍMICA MEDICINAL

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

A disciplina é oferecida aos alunos de pos-graduação cuja pesquisa é destinada ao estudo e desenvolvimento de compostos biologicamente

ativos. A disciplina enfatiza a interdependência das ciências de biologia, medicina, farmacêutica e química com o objetivo de ensinar os

conceitos e técnicas empregados no desenvolvimento racional de novos fármacos.

BIBLIOGRAFIA:

1-Química Medicinal, As bases moleculares da ação dos fármacos/Eliezer J Barreiro, Carlos Alberto Manssur Fraga, 2 Ed, Porto Alegre, Artmed, 2008

2-Química Medicinal, Uma introdução/Gareth Thomas; Guanabara Koogan, 2010

ESTRUTURA ELETRÔNICA E PROPRIEDADES DE SÓLIDOS E INTERFACES

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Abordagem de sólidos e redes cristalinas através do formalismo de espaço recíproco, teorema de Bloch e estrutura de bandas. É estudada a aplicação do formalismo utilizando a Teoria do Funcional da Densidade e cálculos de estrutura eletrônica com condições de contorno periódicas para cálculos de estrutura eletrônica e energia total de estados estendidos em sólidos; estrutura eletrônica e energia total de superfícies;

modos vibracionais da rede cristalina. Finalmente, é abordada a estrutura eletrônica de estados localizados em sólidos.

BIBLIOGRAFIA:

1- I.N. LEVINE, QUANTUM CHEMISTRY, PRENTICE-HALL INTERNATIONAL INC, 1991.

2- VIANNA, FAZZIO E CANUTO, TEORIA QUÂNTICA DE MOLÉCULAS E SÓLIDOS. EDITORA LIVRARIA DA FÍSICA, SÃO PAULO, 2004.

3- N.W. ASHCROFT, SOLID STATE PHYSICS, SAUNDE COLLEGE PUBLISHING, 1976.

4- W.A. HARRISON, ELECTRONIC STRUCTURE AND THE PROPERTIES OF SOLIDS. DOVER PUBLICATIONS INC, NEW YORK, USA, 1989.

5- LITERATURA PRIMÁRIA FORNECIDA PELO PROFESSOR.

6- TUTORIAIS OBTIDOS NO SÍTIO WWW.ABINIT.ORG

QUÍMICA INORGÂNICA AVANÇADA II

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

1- Síntese de Complexos Organometálicos.

2- Técnicas Experimentais em Química de Organometálicos.

3- Processos Fundamentais em Reações de Organometálicos.

4- Aplicações de Organometálicos em Catálise.

BIBLIOGRAFIA:

1- HUHEEY, J.E., KEITER, E.A., KEITER, R.L., INORGANIC CHEMISTRY PRINCIPLES OF STRUCTURE AND REACTIVITY, 4 ED, HARPER COLLINS COLLEGE PUBLISHERS, USA, 1993.

2-F A COTTON, G WILKINSON, C A MURILLO, M BOCHMANN, ADVANCED ORGANIC CHEMISTRY, 6 ED, WILEY, 1999.

3-C E HOUSECROFT, A G SHARPE, INORGANIC CHEMISTRY, 3 ED, PEARSON, ENGLAND, 2008.

4- A. YAMAMOTO, ORGANOTRANSITION METAL CHEMISTRY FUNDAMENTAL CONCEPTS AND APPLICATIONS, WILEY, NEW YORK.

QUÍMICA ORGÂNICA AVANÇADA II

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

1- Estudar os Principais Grupos de Reações Usadas em Síntese Orgânica: Transformação e proteção de Grupos Funcionais.

2- Tópicos Especiais: Estudo da Síntese e Reatividade de Substâncias Orgânicas.

3- Metodologia e Introdução a Retrossíntese e Síntese Orgânica.

BIBLIOGRAFIA:

1- F.A. CAREY, R.J. SUNDBERG, ADVANCED ORGANIC CHEMISTRY, PLENUM PRESS, USA, 4ª ED, 2004.

2- J. MARCH, ADVANCED ORGANIC CHEMISTRY: REACTIONS, MECHANIS AND STRUCTURE, 6ª ED., MCGRAW-HILL, USA, 2007.

3-P G M WURTS, T W Greene, Protecting Groups, 4ª ED., Wiley, USA, 2007.

Página 21/180 - 05/05/2013 18:27:03

4-J Clayden, N Greeves, S Warren, P Wothers, Organic Chemistry, 2 Ed , Oxford Press, 2008

5-M B Smith, Organic Synthesis, 2ª ED., MCGRAW-HILL, USA, 2002.

FÍSICO-QUÍMICA DE BIOMACROMOLÉCULAS

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 30 h

Créditos: 2

EMENTA:

Análise morfo-funcional de proteínas e enzimas, ácidos nucleicos, lipídios e carboidratos complexos. Princípios fundamentais. Estrutura das macromoléculas. Partículas coloidais (forma, estrutura, solvatação), comportamento óptico, mecânico, cinético, e elétrico dos colóides, fenômenos de superfície. Fatores influenciando a seleção de processos de extração e de fracionamento de produtos naturais. Estrutura e conformação das proteínas. Métodos micrométricos para determinar as propriedades físicas e químicas das macromoléculas biológicas (determinação das propriedades moleculares, critério de pureza e homogeneidade das proteínas, espectrofotometria, cromatografia, microcalorimetria, eletroforese, focalização isoeletrica, polarografia e ultracentrifugação.

BIBLIOGRAFIA:

C S TSAI, BIOMACROMOLECULES: Introduction to Structure, Function and Informatics, WILEY, ENGLAND, 2006.

MECÂNICA QUÂNTICA APLICADA: MÉTODOS DE ESTRUTURA ELETRÔNICA

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 90 h

Créditos: 6

EMENTA:

Apresentação de diferentes métodos e/ou teorias utilizados na determinação da estrutura eletrônica a partir da qual podem ser determinadas várias das propriedades dos sistemas químicos. (Exemplo: Energias Moleculares e estruturas de configuração, Freqüências vibracionais, Espectros de Infravermelho e Raman, Propriedades Termoquímicas, etc.). Introduzir a utilização de softwares utilizados na Química Computacional. Temas: 1) Equação de Schrodinger, 2) Hamiltoniano Molecular, 3) Unidades Atômicas, 4) Aproximação de Born-Oppenheimer, 5) Teoria de Hartree-Fock, 6) Orbitais Moleculares, 7) Princípio Variacional, 8) Métodos de correlação eletrônica, 9) Teoria de perturbações, 10) Teoria do Funcional da Densidade, 11) Química Computacional: GAUSSIAN, SIESTA, etc.

BIBLIOGRAFIA:

1-L PAULING, E B WILSON Jr, INTRODUCTION TO QUANTUM MECHANICS, DOVER, USA, 1985.

2-A YARIV, QUANTUM ELECTRONICS, 3 ED, WILEY, 1989.

3-P ATKINS, R FRIEDMAN, MOLECULAR QUANTUM MECHANICS, UNIVERSITY PRESS, ENGLAND, 2008.

PRINCÍPIOS DE AUTOMAÇÃO E ANÁLISE EM FLUXO

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 45 h

Créditos: 3

EMENTA:

Introdução aos métodos automáticos de análise ; Componentes de sistema FIA; Modalidades de FIA; Dispersão em sistemas FIA; Principais detectores empregados em FIA; Aplicações de FIA com diferentes detectores; Sistema de Análise por Injeção Sequencial (SIA); Aplicações de FIA e SIA para determinação de analitos de interesse farmacêutico. Eletrônica Analógica; Principais componentes da eletrônica analógica e seus princípios de funcionamento; Eletrônica Digital; Principais componentes da eletrônica digital e seus princípios de funcionamento Programação em linguagem Visual Basic para aquisição de dados e controle de equipamentos, via interface paralela padrão e PCL 711.

BIBLIOGRAFIA:

1- M TROJANOWICZ, FLOW INJECTION ANALYSIS, WORLD SCIENTIFIC, USA, 2000.

2- J Ruzicka, E H HANSEN, FLOW INJECTION ANALYSIS, 2 ED, WILEY, 1988.

QUÍMICA DOS COMPLEXOS ORGANOMETÁLICOS

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Propriedades Gerais dos Complexos Organometálicos, Compostos Ciclometalados, Clusters e Ligação Metal-Metal, Reatividade, Catálise

Homogênea e Híbrida, Aplicações em Síntese Orgânica.

BIBLIOGRAFIA:

1- HUHEEY, J.E., KEITER, E.A., KEITER, R.L., INORGANIC CHEMISTRY PRINCIPLES OF STRUCTURE AND REACTIVITY, 4 ED, HARPER COLLINS COLLEGE PUBLISHERS, USA, 1993.

2- F. A. COTTON, G. WILKINSON, C. A. MURILLO, M. BOCHMANN, ADVANCED ORGANIC CHEMISTRY, 6 ED, WILEY, 1999.

3- C. E. HOUSECROFT, A. G. SHARPE, INORGANIC CHEMISTRY, 3 ED, PEARSON, ENGLAND, 2008.

4- A. YAMAMOTO, ORGANOTRANSITION METAL CHEMISTRY FUNDAMENTAL CONCEPTS AND APPLICATIONS, WILEY, NEW YORK.

MATERIAIS VIDROS E VITROCERÂMICAS

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 90 h

Créditos: 6

EMENTA:

Introdução aos conceitos termodinâmicos, cinéticos e estruturais do estado vítreo. Processos de cristalização em materiais amorfos. Aplicações dos materiais vítreos e vitrocerâmicos (fibras ópticas, amplificadores ópticos, armazenamento de dados etc).

BIBLIOGRAFIA:

1- NARAYAN, P. COLOMBO, Advances in Bioceramics and Porous Ceramics IV: Ceramic Engineering and Science Proceedings, WILEY, USA, 2011.

2- W. HOLAND, G. H. BEALL, Glass Ceramic Technology, WILEY, 2 ED, USA, 2012.

SEMINÁRIOS I

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Sim

Área de Concentração: Química

Carga Horária: 15 h

Créditos: 1

EMENTA:

Seminários ministrados pelos discentes e docentes do Programa além de convidados especialistas na área de Química e afim.

BIBLIOGRAFIA:

Variada

SEMINÁRIOS II

Nível: Doutorado

Obrigatória: Sim

Área de Concentração: Química

Carga Horária: 15 h

Créditos: 1

EMENTA:

Seminários ministrados pelos discentes e docentes do Programa além de convidados especialistas na área de Química e afins.

BIBLIOGRAFIA:

Variada

TÓPICOS EM QUÍMICA II

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Varia de acordo com interesses específicos de projetos de pesquisa em desenvolvimento junto ao Programa de Pós-Graduação em Química (Mestrado e Doutorado).

BIBLIOGRAFIA:

Variada

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Sim

Área de Concentração: Química

Carga Horária: 150 h

Créditos: 10

EMENTA:

Desenvolvimento, redação e defesa da dissertação de Mestrado.

BIBLIOGRAFIA:

Variada

TESE DE DOUTORADO

Nível: Doutorado

Obrigatória: Sim

Área de Concentração: Química

Carga Horária: 360 h

Créditos: 24

EMENTA:

Desenvolvimento, redação e defesa da Tese de Doutorado.

BIBLIOGRAFIA:

Variada

ESTÁGIO DOCÊNCIA I

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Sim

Área de Concentração: Química

Carga Horária: 30 h

Créditos: 2

EMENTA:

Treinamento dos mestrandos em atividades de docência em cursos de graduação da área de química.

BIBLIOGRAFIA:

Variada

ESTÁGIO DOCÊNCIA II

Nível: Doutorado

Obrigatória: Sim

Área de Concentração: Química

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Treinamento dos doutorandos em atividades de docência em cursos de graduação da área de química.

BIBLIOGRAFIA:

Variada

NANOMATERIAIS

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 30 h

Créditos: 2

EMENTA:

Breve histórico da nanociência e a nanotecnologia; sistemas de baixa dimensionalidade, confinamento quântico, poço quântico, fio quântico, ponto quântico, nanotubo, ligações químicas, propriedades eletrônicas e estruturais; síntese e fabricação de nanomateriais, técnicas de caracterização.

BIBLIOGRAFIA:

1-Charles P. Poole Jr., Frank J. Owens. Introduction to Nanotechnology, Wiley; 1 Ed, 2003.

2-WASER, Rainer. Nanoelectronics and information technology: advanced electronic materials and novel devices. 2 ed. Aachen: Wiley-VCH, 2003.

3- Mark A. Ratner, Mark A. Ratner, Nanotechnology: A Gentle Introduction to the Next Big Idea, Prentice Hall, 2002

4- Duran; N, Mattoso; L. H, Morais; P. C. Nanotecnologia: Introdução, Preparação e Caracterização de Nanomateriais e Exemplos de Aplicação. ArtLiber, 2003

2- Duran; N, Mattoso; L. H, Morais; P. C. Nanotecnologia: Introdução, Preparação e Caracterização de Nanomateriais e Exemplos de Aplicação. ArtLiber, 2003

CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Conceitos básicos relacionados às principais técnicas usadas na caracterização de materiais; manuseio de equipamentos, aquisição e interpretação de resultados e preparação de amostras. Técnicas principais: difração de raios-X, microscopia de varredura de elétrons, microscopia de transmissão de elétrons, espectroscopia de raios-X e microscopia de força atômica.

BIBLIOGRAFIA:

1) Elton N Kaufmann, Characterization of Materials Vol 1 and 2 , Wiley, USA, 2003.

2) Callister Jr., William D., Ciência e Engenharia de Materiais -Uma Introdução, 7ª Ed. , Editora: Ltc, 2008

3) Neil W. Ashcroft e N. David Mermin, Física do Estado Sólido, Cengage Learning, 2011

4) Shackelford, James F, Ciência dos Materiais , 6ª Edição, Pearson Education, 2008

SENSORES E BIOSENSORES

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 30 h

Créditos: 2

EMENTA:

Definição de sensores e biossensores; Elementos de transdução; Sensores e biossensores eletroquímicos, potenciométricos, amperométricos e condutimétricos; Transistores de efeito de campo; Aplicações de sensores FET; Transdutores eletroquímicos; Potenciometria e eletrodos de íons seletivos; Voltametria e amperometria; Condutividade; Eletrodos modificados; Eletrodos modificados com filmes finos; Microeletrodos e eletrodos impressos; Elementos de sensor; Técnicas de sensores óticos; Elementos de reconhecimento iônico e molecular; Seletividade; Sensibilidade; Precisão, acurácia e repetibilidade.

BIBLIOGRAFIA:

1- Brian R Eggs, Chemical Sensors and Biosensors, Wiley, 2002.

2- Challa S. S. R. Kumar. Nanomaterials for Biosensors, Wiley, 2007.

ELETROQUÍMICA E ELETROANALÍTICA

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Modelos de Dupla-Camada Elétrica, Fenômenos de Adsorção e Isothermas, Influência do Tipo de Solvente na Adsorção, Processos de Eletrodo, Equação de Butler-Volmer, Equação de Tafel, Fenômenos Capacitivos, Resistivos e de Transferência de Carga, Polarografia, Métodos Voltamétricos, Curvas Analíticas e Curvas de Recuperação.

BIBLIOGRAFIA:

- 1- J. Wang, Analytical Electrochemistry, Wiley-VCH, Alemanha, 2006.
- 2- A. J. Bard, L. R. Faulkner, Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications, Wiley, Alemanha, 2000.
- 3- E. J. O'M. Bockris, A.K.N. Reddy, Modern electrochemistry, vol.2, Plenum Press, New York, 1970.
- 4- A. J. Bard, L. R. Faulkner, Electrochemical Methods, Interscience, New York, 1980.

FÍSICA DA MATERIA CONDENSADA

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Estrutura cristalina; difração em cristal, a rede recíproca; ligação cristalina; vibrações da rede; gás de fermi de elétrons livre; bandas de energia; cristais semicondutores; superfícies de fermi e metais.

BIBLIOGRAFIA:

- 1-N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics, Holt, Rineheart and Winston, 1976.
- 2- C. Kittel, Introdução a física do estado sólido, LTC, 2006.
- 3- J. Singleton, Band Theory and Electronic Properties of Solids, Oxford, 2001.

TÓPICOS EM QUÍMICA III

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Variada

BIBLIOGRAFIA:

Variada, de acordo com o conteúdo.

TERMODINÂMICA AVANÇADA

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Potenciais Termodinâmicos. Conceitos de Termodinâmica estatística. Termodinâmica de sólidos. Termodinâmica de transformação de fase. Termodinâmica química.

BIBLIOGRAFIA:

1- Rogone, D.V., "Thermodynamics of Materials: Thermodynamics", vol I, Wiley , 1994.

2- Rogone, D.V., "Thermodynamics of Materials: Kinetics", vol II, Wiley , 1994.

3- Hudson, J. B., Thermodynamics of Materials: A Classical and Statistical Synthesis, Wiley, 1996.

CATÁLISE HETEROGÊNEA

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

A presente disciplina deverá abordar três principais aspectos. O primeiro deles será a abordagem sobre os aspectos relacionados aos fenômenos de adsorção uma vez que a adsorção é uma etapa essencial na catálise heterogênea. Diversos conceitos sobre a catálise em sólidos serão discutidos, bem como as principais técnicas experimentais empregadas na caracterização dos catalisadores sólidos.

BIBLIOGRAFIA:

- 1 - DK Chakrabarty and B. Viswanathan, Heterogeneous Catalysis, 1 Ed, New Age International Ltd., Publishers, 2008.
- 2 – M. Bowker, The Basis and Applications of Heterogeneous Catalysis, Oxford, 1998.
- 3 - R.M. Cornell, U. Schwertmann, The Iron Oxides, 3 ed., Weinheim-VHC, EUA, 2003.
- 4 - Atkins, P., Princípios de Química, BOOKMAN, 2001.

CINÉTICA QUÍMICA

Nível: Mestrado Acadêmico

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Conceitos de cinética química. Reações complexas. Superfícies de energia potencial e dinâmica de reação. Teoria do estado de transição.

Teorias de reações unimoleculares. Reações em sistemas homogêneos e heterogêneos.

BIBLIOGRAFIA:

1. ATKINS, P. W.; Físico-Química, vol.2, .8ª ed. Rio de Janeiro: LTC,. 2008.
2. FLOGER, H.S.; Elementos de Engenharia das Reações, 3ª ed. Rio de Janeiro: LTC, 2002.
3. LEVENSPIEL, O; Engenharia das Reações Químicas, São Paulo: Edgar Blücher, 2000.
4. LEVINE, I. Physical Chemistry, 5th ed. New York: McGraw-Hill, 2002.
5. MOORE, W. J. Físico-Química, vol. 1 e 2. São Paulo: Edgard Blücher, 1976.

BIOINORGÂNICA

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

- 1- O Uso de Complexos Metálicos na Medicina
- 2- Utilização dos Compostos de Coordenação na Quimioterapia do Câncer, como Agentes Antiparasitários e no Tratamento de Artrite
- 3- Novas Perspectivas do Uso de Complexos Metálicos em Medicina
- 4- Íons Metálicos Constituintes de Proteínas, Enzimas e Outras Biomoléculas

BIBLIOGRAFIA:

- 1- N.FARREL,TRANSITION METAL COMPLEXES AS DRUGS AND CHEMOTHERAPEUTIC AGENTS, HUMAN PRESS,ENGLAND, 2000.
- 2- S. J. LIPPARD, J.M.BERG,PRINCIPLES OF BIOINORGANIC CHEMISTRY, UNIVERSITY SCIENCE BOOKS,USA,1994.

3-I Bertini, H B Gray, E I Stiefel, J S Valentine Biological Inorganic Chemistry, University Science Book, USA, 2007

4-W Kam, B Schwederski, Bioinorganic Chemistry, Wiley, USA, 2005

MÉTODOS FÍSICOS DA ANÁLISE

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

1- Espectroscopia no Infravermelho.

2- Espectroscopia no Ultravioleta.

3- Ressonância Magnética Nuclear.

4- Espectrometria de massas.

BIBLIOGRAFIA:

1- CLARIDGE, T.D.W., HIGH-RESOLUTION NMR TECHNIQUES IN ORGANIC CHEMISTRY. Elsevier, UK, 2005

2- WILLIAMS, D.H., FLEMING, M.A., SPECTROSCOPIC METHODS IN ORGANIC CHEMISTRY, 2ª ED. MCGRAW-HILL. ENGLAND, 1973.

3- SILVERSTEIN, R.M., BASSLER, G.S., MORRIL, T.C., IDENTIFICAÇÃO ESPECTROMÉTRICA DE COMPOSTOS ORGÂNICOS. 7ª ED. LTC, 2007.

4- J T WATSON, O D SPARKMAN, INTRODUCTION TO MASS SPECTROMETRY, 4 ED, WILEY, 2007

4- BARROW, G.M., INTRODUCTION TO MOLECULAR SPECTROSCOPY. MCGRAW-HILL INTERNATIONAL EDITIONS. USA, 1962.

5- KETTLE, S.F.A., PHYSICAL INORGANIC CHEMISTRY. EPEKTRUM. USA, 1996

MÉTODOS DE SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE LÍQUIDOS

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

1- Introdução à Simulação Computacional

2- Mecânica Estatística

3- Dinâmica Molecular

4- Métodos de Montecarlo

5- Análise de Resultados na Estrutura Líquida

BIBLIOGRAFIA:

1- M.P.ALLEN, D.J.TILDESLEY. COMPUTER SIMULATION OF LIQUIDS. OXFORD SCIENCE PUBLICATIONS, 1997.

2-F JENSEN, INTRODUCTION TO COMPUTATIONAL CHEMISTRY, WILEY, ENGLAND, 2002.

TÓPICOS EM QUÍMICA IV

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 30 h

Créditos: 2

EMENTA:

Varia de acordo com interesses específicos de projetos de pesquisa em desenvolvimento junto ao Programa de Pós-Graduação em Química (Doutorado).

BIBLIOGRAFIA:

Variada

MÉTODOS ELETROQUÍMICOS DE ANÁLISE

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Nesta disciplina se prevê o estudo de diferentes métodos eletroanalíticos, demonstrando as suas potencialidades quanto à técnica de análise para diferentes analitos. Serão abordados aspectos teóricos e práticos de cada uma das técnicas mencionadas no programa. O uso de sistemas de análise por injeção em fluxo associados aos métodos de detecção eletroanalíticas serão introduzidos.

BIBLIOGRAFIA:

- 1- A. J. BARD E L.R. FAULKNER, ELECTROCHEMICAL METHODS: FUNDAMNETALS AND APPLICATIONS. JOHN WILEY & SONS, 2001.
- 2- M. A. C. BRETT E A. M .O. BRETT. ELETROCHEMISTRY: PRINCIPLES, METHODS AND APPLICATIONS, OXFORD NEW YORK: OXFORD UNIVERSITY PRESS, 1993.
- 3- J. HEYROWSKY E J. KUTA, PRINCIPLES OF POLAROGRAPHY. ACADEMIC PRESS, 1966.
- 4- T. RILEY, C.TOMLINSON E A.M. JAMES, PRINCIPLES OF ELECTROANALYTICAL METHODS (ANALYTICAL CHEMISTRY BY OPEN LEARNING), WILEY , 1987.

CRISTALOGRAFIA ESTRUTURAL

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

1- Simetria no Estado Sólido.

2- Difração de Raios-X.

3- Determinação de Estrutura Cristalina.

4- Programas de Resolução, Refinamento e Desenho de Estruturas Cristalinas.

BIBLIOGRAFIA:

1- M.F.C. LADD and R.A. PALMER, STRUCTURE DETERMINATION BY X-RAY CRYSTALLOGRAPHY. PLENUM PRESS - 3 ED, 1994.

2- M. WOOLFSON, AN INTRODUCTION TO X-RAY CRYSTALLOGRAPHY. CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS - 2 ED, 1997.

TERMODINÂMICA ESTATÍSTICA

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Revisar conceitos clássicos de entropia estatística e teoria cinética dos gases e obter a distribuição de velocidades de Maxwell; Conceituar a distribuição de Boltzmann em

um sistema molecular e um ensemble de sistemas; Associar a função de partição com propriedades termodinâmicas: capacidade calorífica, entropia, entalpia, energia interna e energia de Gibbs; Estimar energias de transição translacional, rotacional, vibracional e eletrônica a partir de dados espectroscópicos e correlacionar com a distribuição de energia de Boltzmann.

BIBLIOGRAFIA:

1 - Castellan, Fund. Físico-Química, 2001.

2 - Eisberg e Lerner, Física, Fund. Apl., vol.2, Eisberg e Lerner ,1981.

3 - Eisberg e Resnick, Física Quântica.

4 - Entropy, Conceptual Disorder, J. Chem. Educ., 1988, 65(5), 403.

Página 28/180 - 05/05/2013 18:27:03

5 - H B Callen, Thermodynamics and an introduction to thermostatics, 2 Ed, wiley, 1985

QUÍMICA MEDICINAL

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

A disciplina é oferecida aos alunos de pós-graduação cuja pesquisa é destinada ao estudo e desenvolvimento de compostos biologicamente ativos. A disciplina enfatiza a interdependência das ciências de biologia, medicina, farmacêutica e química com o objetivo de ensinar os conceitos e técnicas empregados no desenvolvimento racional de novos fármacos.

BIBLIOGRAFIA:

1-Química Medicinal, As bases moleculares da ação dos fármacos/Eliezer J Barreiro, Carlos Alberto Manssur Fraga, 2 Ed, Porto Alegre, Artmed, 2008

ESTRUTURA ELETRÔNICA E PROPRIEDADES DE SÓLIDOS E INTERFACES

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Abordagem de sólidos e redes cristalinas através do formalismo de espaço recíproco, teorema de Bloch e estrutura de bandas. É estudada a aplicação do formalismo utilizando a Teoria do Funcional da Densidade e cálculos de estrutura eletrônica com condições de contorno periódicas para cálculos de estrutura eletrônica e energia total de estados estendidos em sólidos; estrutura eletrônica e energia total de superfícies; modos vibracionais da rede cristalina. Finalmente, é abordada a estrutura eletrônica de estados localizados em sólidos.

BIBLIOGRAFIA:

1- I.N. LEVINE, QUANTUM CHEMISTRY, PRENTICE-HALL INTERNATIONAL INC, 1991.

2- VIANNA, FAZZIO E CANUTO, TEORIA QUÂNTICA DE MOLÉCULAS E SÓLIDOS. EDITORA LIVRARIA DA FÍSICA, SÃO PAULO, 2004.

3- N.W. ASHCROFT, SOLID STATE PHYSICS, SAUNDE COLLEGE PUBLISHING, 1976.

4- W.A. HARRISON, ELECTRONIC STRUCTURE AND THE PROPERTIES OF SOLIDS. DOVER PUBLICATIONS INC, NEW YORK, USA, 1989.

QUÍMICA INORGÂNICA AVANÇADA II

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

- 1- Síntese de Complexos Organometálicos.
- 2- Técnicas Experimentais em Química de Organometálicos.
- 3- Processos Fundamentais em Reações de Organometálicos.
- 4- Aplicações de Organometálicos em Catálise.

BIBLIOGRAFIA:

- 1- HUHEEY, J.E., KEITER, E.A., KEITER, R.L., INORGANIC CHEMISTRY PRINCIPLES OF STRUCTURE AND REACTIVITY, 4 ED, HARPER COLLINS COLLEGE PUBLISHERS, USA, 1993.
- 2- F A COTTON, G WILKINSON, C A MURILLO, M BOCHMANN, ADVANCED ORGANIC CHEMISTRY, 6 ED, WILEY, 1999.
- 3- C E HOUSECROFT, A G SHARPE, INORGANIC CHEMISTRY, 3 ED, PEARSON, ENGLAND, 2008.
- 4- A. YAMAMOTO, ORGANOTRANSITION METAL CHEMISTRY FUNDAMENTAL CONCEPTS AND APPLICATIONS, WILEY, NEW YORK.

QUÍMICA ORGÂNICA AVANÇADA II

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

1- Estudar os Principais Grupos de Reações Usadas em Síntese Orgânica: Transformação e proteção de Grupos Funcionais.

2- Tópicos Especiais: Estudo da Síntese e Reatividade de Substancias Orgânicas.

3- Metodologia e Introdução a Retrossíntese e Síntese Orgânica.

BIBLIOGRAFIA:

1- F. A. CAREY, R.J. SUNDBERG, ADVANCED ORGANIC CHEMISTRY, PLENUM PRESS, USA, 4ª ED, 2004.

2- J. MARCH, ADVANCED ORGANIC CHEMISTRY: REACTIONS, MECHANIS AND STRUCTURE, 6 ED., MCGRAW-HILL, USA, 2007.

3-P G M WURTS, T W Greene, Protecting Groups, 4ª ED., Wiley, USA, 2007.

4-J CLAYDEN, N GREEVES, S WARREN, P WOTHERS, ORGANIC CHEMISTRY, 2 ED , OXFORD, 2008

5-M B Smith, Organic Synthesis, 2ª ED., MCGRAW-HILL, USA, 2002.

FÍSICO-QUÍMICA DE BIOMACROMOLÉCULAS

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Análise morfo-funcional de proteínas e enzimas, ácidos nucléicos, lipídios e carboidratos complexos. Princípios fundamentais. Estrutura das macromoléculas. Partículas coloidais (forma, estrutura, solvatação), comportamento óptico, mecânico, cinético, e elétrico dos colóides, fenômenos de superfície. Fatores influenciando a seleção de processos de extração e de fracionamento de produtos naturais. Estrutura

e conformação das proteínas. Métodos micrométricos para determinar as propriedades físicas e químicas das macromoléculas biológicas (determinação das propriedades moleculares, critério de pureza e homogeneidade das proteínas, espectrofotometria, cromatografia, microcalorimetria, eletroforese, focalização isoelétrica, polarografia e ultracentrifugação.

BIBLIOGRAFIA:

C S TSAI, BIOMACROMOLECULES: Introduction to Structure, Function and Informatics, WILEY, ENGLAND, 2006.

MECÂNICA QUÂNTICA APLICADA: MÉTODOS DE ESTRUTURA ELETRÔNICA

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Apresentação de diferentes métodos e/ou teorias utilizados na determinação da estrutura eletrônica a partir da qual podem ser determinadas várias das propriedades dos sistemas químicos. (Exemplo: Energias Moleculares e estruturas de configuração, Freqüências vibracionais, Espectros de Infravermelho e Raman, Propriedades Termoquímicas, etc.). Introduzir a utilização de softwares utilizados na Química Computacional. Temas: 1) Equação de Schrodinger, 2) Hamiltoniano Molecular, 3) Unidades Atômicas, 4) Aproximação de Born-Oppenheimer, 5) Teoria de Hartree-Fock, 6) Orbitais Moleculares, 7) Principio Variacional, 8) Métodos de correlação eletrônica, 9) Teoria de perturbações, 10) Teoria do Funcional da Densidade, 11) Química Computacional: GAUSSIAN, SIESTA, etc.

BIBLIOGRAFIA:

1-L PAULING, E B WILSON Jr, INTRODUCTION TO QUANTUM MECHANICS, DOVER, USA, 1985.

2-A YARIV, QUANTUM ELECTRONICS, 3 ED, WILEY, 1989.

3-P ATKINS, R FRIEDMAN, MOLECULAR QUANTUM MECHANICS, UNIVERSITY PRESS, ENGLAND, 2008.

PRINCÍPIOS DE AUTOMAÇÃO E ANÁLISE EM FLUXO

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Introdução aos métodos automáticos de análise ; Componentes de sistema FIA; Modalidades de FIA; Dispersão em sistemas FIA; Principais detectores empregados em FIA; Aplicações de FIA com diferentes detectores; Sistema de Análise por Injeção Sequencial (SIA); Aplicações de FIA e SIA para determinação de analitos de interesse farmacêutico. Eletrônica Analógica; Principais componentes da eletrônica analógica e seus princípios de funcionamento; Eletrônica Digital; Principais componentes da eletrônica digital e seus princípios de funcionamento Programação em linguagem Visual Basic para aquisição de dados e controle de equipamentos, via interface paralela padrão e PCL 711.

BIBLIOGRAFIA:

1- M TROJANOWICZ, FLOW INJECTION ANALYSIS, WORLD SCIENTIFIC, USA, 2000.

2- J Ruzicka, E H HANSEN, FLOW INJECTION ANALYSIS, 2 ED, WILEY, 1988.

QUÍMICA DOS COMPLEXOS ORGANOMETÁLICOS

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Propriedades Gerais dos Complexos Organometálicos, Compostos Ciclometalados, Clusters e Ligação Metal-Metal, Reatividade, Catálise Homogênea e Híbrida, Aplicações em Síntese Orgânica.

BIBLIOGRAFIA:

1- HUHEEY, J.E., KEITER, E.A., KEITER, R.L., INORGANIC CHEMISTRY PRINCIPLES OF STRUCTURE AND REACTIVITY, 4 ED, HARPER COLLINS COLLEGE PUBLISHERS, USA, 1993.

2- F. A. COTTON, G. WILKINSON, C. A. MURILLO, M. BOCHMANN, ADVANCED ORGANIC CHEMISTRY, 6 ED, WILEY, 1999.

3- C. E. HOUSECROFT, A. G. SHARPE, INORGANIC CHEMISTRY, 3 ED, PEARSON, ENGLAND, 2008.

4- A. YAMAMOTO, ORGANOTRANSITION METAL CHEMISTRY FUNDAMENTAL CONCEPTS AND APPLICATIONS, WILEY, NEW YORK.

MATERIAIS VIDROS E VITROCERÂMICAS

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Introdução aos conceitos termodinâmicos, cinéticos e estruturais do estado vítreo. Processos de cristalização em materiais amorfos. Aplicações dos materiais vítreos e vitrocerâmicos (fibras ópticas, amplificadores ópticos, armazenamento de dados etc).

BIBLIOGRAFIA:

1-NARAYAN, P COLOMBO, *Advances in Bioceramics and Porous Ceramics IV: Ceramic Engineering and Science Proceedings*, WILEY, USA, 2011.

2- W HOLAND, G H BEALL, *Glass Ceramic Technology*, WILEY, 2 ED, USA, 2012.

NANOMATERIAIS

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 30 h

Créditos: 2

EMENTA:

Breve histórico da nanociência e a nanotecnologia; sistemas de baixa dimensionalidade, confinamento quântico, poço quântico, fio quântico, ponto quântico, nanotubo, ligações químicas, propriedades eletrônicas e estruturais; síntese e fabricação de nanomateriais, técnicas de caracterização.

BIBLIOGRAFIA:

1-Charles P. Poole Jr., Frank J. Owens. *Introduction to Nanotechnology*, Wiley; 1 Ed, 2003.

2-WASER, Rainer. *Nanoelectronics and information technology: advanced electronic materials and novel devices*. 2 ed. Aachen: Wiley-VCH, 2003.

3- Mark A. Ratner, Mark A. Ratner, *Nanotechnology: A Gentle Introduction to the Next Big Idea*, Prentice Hall, 2002

4- Duran; N, Mattoso; L. H, Morais; P. C. *Nanotecnologia: Introdução, Preparação e Caracterização de Nanomateriais e Exemplos de Aplicação*. ArtLiber, 2003

CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Conceitos básicos relacionados às principais técnicas usadas na caracterização de materiais; manuseio de equipamentos, aquisição e interpretação de resultados e preparação de amostras. Técnicas principais: difração de raios-X, microscopia de varredura de elétrons, microscopia de transmissão de elétrons, espectroscopia de raios-X e microscopia de força atômica.

BIBLIOGRAFIA:

- 1) Elton N Kaufmann, Characterization of Materials Vol 1 and 2, Wiley, USA, 2003.
- 2) Callister Jr., William D., Ciência e Engenharia de Materiais -Uma Introdução, 7ª Ed. , Editora: Ltc, 2008
- 3) Neil W. Ashcroft e N. David Mermin, Física do Estado Sólido, Cengage Learning, 2011
- 4) Shackelford, James F, Ciência dos Materiais , 6ª Edição, Pearson Education, 2008

SENSORES E BIOSENSORES

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 30 h

Créditos: 2

EMENTA:

Definição de sensores e biossensores; Elementos de transdução; Sensores e biossensores eletroquímicos, potenciométricos, amperométricos e condutimétricos; Transistores de efeito de campo; Aplicações de sensores FET; Transdutores

eletroquímicos; Potenciometria e eletrodos de íons seletivos; Voltametria e amperometria; Condutividade; Eletrodos modificados; Eletrodos modificados com filmes finos; Microeletrodos e eletrodos impressos; Elementos de sensor; Técnicas de sensores óticos; Elementos de reconhecimento iônico e molecular; Seletividade; Sensibilidade; Precisão, acurácia e repetibilidade.

BIBLIOGRAFIA:

- 1- Brian R Eggs, Chemical Sensors and Biosensors, Wiley, 2002.
- 2- Challa S. S. R. Kumar. Nanomaterials for Biosensors, Wiley, 2007.

ELETROQUÍMICA E ELETROANALÍTICA

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Modelos de Dupla-Camada Elétrica, Fenômenos de Adsorção e Isotermas, Influência do Tipo de Solvente na Adsorção, Processos de Eletrodo, Equação de Butler-Volmer, Equação de Tafel, Fenômenos Capacitivos, Resistivos e de Transferência de Carga, Polarografia, Métodos Voltamétricos, Curvas Analíticas e Curvas de Recuperação.

BIBLIOGRAFIA:

- 1- J. Wang, Analytical Electrochemistry, Wiley-VCH, Alemanha, 2006.
- 2- A. J. Bard, L. R. Faulkner, Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications, Wiley, Alemanha, 2000.
- 3- E. J. O'M. Bockris, A.K.N. Reddy, Modern electrochemistry, vol.2, Plenum Press, New York, 1970.
- 4- A. J. Bard, L. R. Faulkner, Electrochemical Methods, Interscience, New York, 1980.

FÍSICA DA MATERIA CONDENSADA

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Estrutura cristalina; difração em cristal, a rede recíproca; ligação cristalina; vibrações da rede; gás de fermi de elétrons livre; bandas de energia; cristais semicondutores; superfícies de fermi e metais.

BIBLIOGRAFIA:

- 1- N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics, Holt, Rineheart and Winston, 1976.
- 2- C. Kittel, Introdução a física do estado sólido, LTC, 2006.
- 3- J. Singleton, Band Theory and Electronic Properties of Solids, Oxford, 2001.

TERMODINÂMICA AVANÇADA

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Potenciais Termodinâmicos. Conceitos de Termodinâmica estatística. Termodinâmica de sólidos. Termodinâmica de transformação de fase. Termodinâmica química.

BIBLIOGRAFIA:

- 1- Rogone, D.V., "Thermodynamics of Materials: Thermodynamics", vol I, Wiley , 1994.

2- Rogone, D.V., "Thermodynamics of Materials: Kinetics", vol II, Wiley , 1994.

3- Hudson, J. B., Thermodynamics of Materials: A Classical and Statistical Synthesis, Wiley, 1996.

CATÁLISE HETEROGÊNEA

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

A presente disciplina deverá abordar três principais aspectos. O primeiro deles será a abordagem sobre os aspectos relacionados aos fenômenos de adsorção uma vez que a adsorção é uma etapa essencial na catálise heterogênea. Diversos conceitos sobre a catálise em sólidos serão discutidos, bem como as principais técnicas experimentais empregadas na caracterização dos catalisadores sólidos.

BIBLIOGRAFIA:

1 - DK Chakrabarty and B. Viswanathan, Heterogeneous Catalysis, 1 Ed, New Age International Ltd., Publishers, 2008.

2 – M. Bowker, The Basis and Applications of Heterogeneous Catalysis, Oxford, 1998.

3 - R. M. Cornell, U. Schwertmann, The Iron Oxides, 3 ed., Weinheim-VHC, EUA, 2003.

4 - Atkins, P., Princípios de Química, BOOKMAN, 2001.

CINÉTICA QUÍMICA

Nível: Doutorado

Obrigatória: Não

Carga Horária: 60 h

Créditos: 4

EMENTA:

Conceitos de cinética química. Reações complexas. Superfícies de energia potencial e dinâmica de reação. Teoria do estado de transição. Teorias de reações unimoleculares. Reações em sistemas homogêneos e heterogêneos.

BIBLIOGRAFIA:

1. ATKINS, P. W.; Físico-Química, vol.2, .8ª ed. Rio de Janeiro: LTC,. 2008.
2. FLOGGER, H.S.; Elementos de Engenharia das Reações, 3ª ed. Rio de Janeiro: LTC, 2002.
3. LEVENSPIEL, O; Engenharia das Reações Químicas, São Paulo: Edgar Blücher, 2000.
4. LEVINE, I. Physical Chemistry, 5th ed. New York: McGraw-Hill, 2002.
5. MOORE, W. J. Físico-Química, vol. 1 e 2. São Paulo: Edgard Blücher, 1976.