
DISCIPLINAS - PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

DISCIPLINA: SEMINÁRIOS I

EMENTA:

Seminários ministrados pelos docentes e discentes do Programa, e por pesquisadores convidados.

BIBLIOGRAFIA:

1. Diversa.
-

DISCIPLINA: SEMINÁRIOS II

EMENTA:

Seminários ministrados pelos docentes e discentes do Programa, e por pesquisadores convidados.

BIBLIOGRAFIA:

1. Diversa.
-

DISCIPLINA: BIOCATÁLISE

EMENTA:

História de biocatálise. Natureza dos biocatalisadores. Enzimas: classificação e mecanismos de catálise. Extração e produção de enzimas. Cinética enzimática: determinação da atividade e caracterização bioquímica e cinética de enzimas. Imobilização de enzimas e células. Aplicações da biocatálise.

BIBLIOGRAFIA:

1. Nelson, D. L.; Cox, M. M. Princípios de Bioquímica de Lehninger, 6ª ed., Artmed: Porto Alegre, 2015.
 2. Voet, D.; Voet, J. G. Bioquímica, 4ª ed., Artmed: Porto Alegre, 2013.
 3. Leveson-Gower, R. B.; Mayer, C.; Roelfes, G. The importance of catalytic promiscuity for enzyme design and evolution. Nat. Rev. Chem. 3 (2019) 687–705.
-

DISCIPLINA: CINÉTICA QUÍMICA

EMENTA:

Leis de velocidade, mecanismo de reação, equações cinéticas, aproximação do estado estacionário; reações em fase condensada e potencial de força média; teoria do estado de transição, diagrama de energia livre e análise microcinética; integração de equações cinéticas complexas; ciclos catalíticos, TON e TOF; catálise ácida e básica; catálise organometálica e organocatálise; catálise e meio ambiente: eficiência de processos químicos, química verde, Fator E e economia atômica.

BIBLIOGRAFIA:

1. Pilling, M. J.; Seakins, P. W. Reaction kinetics. Oxford University Press, 2009.
2. Houston, P. L. Chemical kinetics and reaction dynamics. McGraw-Hill: New York, 2001.
3. Henriksen, N. E.; Hansen, F. Y. Theories of molecular reaction dynamics: The microscopic foundation of chemical kinetics. 2nd ed.; Oxford University Press, 2019.
4. Rothenberg, G. Catalysis: Concepts and green applications. Wiley-VCH: Weinheim, 2008.
5. Steinborn, D. Fundamentals of organometallic catalysis. Wiley-VCH: Weinheim, 2012.
6. Besora, M.; Maseras, F. Microkinetic modeling in homogeneous catalysis. Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci. 2018, 8, e1372.
7. Ahn, S.; Hong, M.; Sundararajan, M.; Ess, D. H.; Baik, M.-H. Design and optimization of catalysts based on mechanistic insights derived from quantum chemical reaction modeling. Chem. Rev. 2019, 119, 6509–6560.

DISCIPLINA: ESPECTROSCOPIA FUNDAMENTAL

EMENTA:

Natureza da radiação eletromagnética. Propriedades elétricas e magnéticas da matéria. Espectroscopias moleculares: eletrônica (UV-Vis e fotoluminescência), vibracional (Infravermelho e Raman), Difração de raios-X e Ressonância Magnética Nuclear.

BIBLIOGRAFIA:

1. Pavia, D. Introdução à Espectroscopia. 5ª ed. Cengage Learning, 2015.
2. Oswaldo, S. Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho. 2ª ed. Cengage Learning, 2011.
3. Ozaki, Y. Molecular Spectroscopy: A Quantum Chemistry Approach. Wiley-VCH, 2019.

4. McHale, J. L. Molecular Spectroscopy. 2nd ed. CRC Press, 2017.
 5. Steinfeld, J. I. Molecules and Radiation: An Introduction to Modern Molecular Spectroscopy. 2nd ed. Dover, 2012.
 6. Baiz, C. R. et al. Vibrational Spectroscopic Map, Vibrational Spectroscopy, and Intermolecular Interaction. Chem. Rev. 2020, 120, 7152–7218.
 7. Xu, Z. et al. Molecular Sensors for NMR-Based Detection. Chem. Rev. 2019, 119, 195–230.
 8. Saha, A. et al. Electron Diffraction of 3D Molecular Crystals. Chem. Rev. 2022, 122, 13883–13914.
-

DISCIPLINA: FÍSICO-QUÍMICA AVANÇADA I

EMENTA:

Leis da termodinâmica: energia interna, entalpia, entropia; equilíbrio material: energia livre de Gibbs e de Helmholtz; equilíbrio de fases simples; equilíbrio de reações; gases reais; soluções ideais; soluções reais; equilíbrio de fases multicomponentes.

BIBLIOGRAFIA:

1. Levine, I. N. Physical Chemistry. 6th ed. McGraw Hill: Singapore, 2009.
 2. McQuarrie, D. A.; Simon, J. D. Physical Chemistry: A Molecular Approach. University Science Books: Sausalito, 1997.
 3. Kondepudi, D.; Prigogine, I. Modern Thermodynamics: From Heat Engines to Dissipative Structures. 2nd ed. John Wiley & Sons: Chichester, 2015.
-

DISCIPLINA: MATERIAIS INORGÂNICOS AVANÇADOS

EMENTA:

Ligações químicas nos sólidos. Simetria e teoria de grupos. Sólidos cristalinos e amorfos. Sólidos não-estequiométricos. Imperfeições e propriedades físicas de sólidos. Métodos modernos de preparação de materiais: processo sol-gel, evaporação térmica, pirólise, deposição química, fusão-resfriamento, deposição eletrolítica, sputtering. Materiais no estado sólido: monocristais, policristais, filmes finos, pó, fibras. Nanomateriais.

BIBLIOGRAFIA:

1. Callister Jr., W. D. Ciência e Engenharia de Materiais – Uma Introdução. 20ª ed., 2020.

2. Askeland, D. R.; Wright, W. J. Ciência e engenharia dos materiais. 4ª ed., Cengage Learning, 2019.
 3. Zegeye, L. H. Caracterização de materiais usando FTIR, NMR e Espectroscopia Óptica: Espectroscopia FTIR, Espectroscopia NMR, Espectroscopia Óptica, 2020.
 4. Orchin, M.; Jaffe, H. H. Symmetry in Chemistry. Courier Corporation, 2013.
 5. Nakamura, N.; Reeja-Jayan, B. Synchrotron X-ray characterization of materials synthesized under microwave irradiation. 34 (1), 194–205, 2019.
-

DISCIPLINA: MÉTODOS ELETROQUÍMICOS

EMENTA:

Termodinâmica eletroquímica; cinética eletroquímica e processos de transferência de massa; instrumentação usada nas técnicas eletroquímicas; voltametria de varredura e de pulso; cronocoulometria e técnicas de redissolução; sensores eletroquímicos: potenciométricos, voltamétricos e biossensores; medidas de potencial e eletrodos de referência; determinações amperométricas; aplicações de técnicas eletroanalíticas.

BIBLIOGRAFIA:

1. Wang, J. Analytical Electrochemistry. 4th ed. Wiley, 2023.
 2. Fuller, T. F.; Harb, J. N. Electrochemical Engineering. Wiley, 2018.
 3. Brett, A. M.; Oliveira e Brett, C. M. Eletroquímica: Princípios, métodos e aplicações. Oxford University Press, 1993.
 4. Hine, F. Electrode Processes and Electrochemical Engineering. Plenum Press, 1985.
 5. Scholz, F. Electroanalytical Methods: Guide to Experiments and Applications. Springer, 2005.
-

DISCIPLINA: MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS E ESPECTROMÉTRICOS PARA CARACTERIZAÇÃO DE COMPOSTOS ORGÂNICOS

EMENTA:

Fundamentação teórica das principais técnicas espectroscópicas e espectrométricas aplicadas para identificação de compostos orgânicos. Técnicas abordadas: a) espectroscopia na região do infravermelho e ultravioleta-visível; b) espectrometria de massas; c) espectroscopia de ressonância magnética nuclear 1D e 2D (quando aplicável) de diferentes núcleos (^1H , ^{13}C , ^{31}P , ^{19}F etc.). Aplicação conjunta destas técnicas de análise em moléculas simples e complexas.

BIBLIOGRAFIA:

1. Silverstein, R. M.; Webster, F. X.; Kiemle, D. Spectrometric Identification of Organic Compounds. 7th ed. John Wiley & Sons, 2005.
 2. Pavia, D. L.; Lampman, G. M.; Kriz, G. S. Introduction to Spectroscopy. 3rd ed. Thomson Learning, 2001.
 3. Breitmaier, E. Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry: A Practical Guide. 3rd ed. John Wiley & Sons, 2002.
-

DISCIPLINA: PREPARO DE AMOSTRAS

EMENTA:

Estudo dos aspectos operacionais e metodológicos de processos de preparo de amostras de interesse químico, farmacêutico e toxicológico por diferentes técnicas de extração e microextração (extração líquido-líquido e extração sólido-líquido) e aplicações das técnicas em diferentes campos da análise química.

BIBLIOGRAFIA:

1. Borges, K. B.; Figueiredo, E. C.; Queiroz, M. E. C. Preparo de Amostras para Análise de Compostos Orgânicos. 1ª ed. LTC, 2015.
 2. Moreau, R. L. M.; Siqueira, M. E. P. B. Toxicologia Analítica. 1ª ed. Guanabara Koogan, 2008.
 3. Mitra, S. Sample Preparation Techniques in Analytical Chemistry. Wiley-Interscience, 2003.
 4. Vargas Medina, D. A.; Cardoso, A. T.; Maciel, E. V. S.; Lanças, F. M. Current materials for miniaturized sample preparation: Recent advances and future trends. TrAC Trends in Analytical Chemistry 2023, 165, 117120.
 5. Ouyang, G.; Vuckovic, D.; Pawliszyn, J. Nondestructive sampling of living systems using in vivo solid-phase microextraction. Chem. Rev. 2011, 111, 2784–2814.
-

DISCIPLINA: QUÍMICA ANALÍTICA AVANÇADA I

EMENTA:

Definição de termos em Química Analítica; equilíbrio químico e atividade; fundamentos e aplicações de equilíbrios ácido-base, de precipitação, complexação e óxido-redução; métodos clássicos de análise; fundamentos de análises volumétricas; aplicação dos conceitos de equilíbrio químico em técnicas instrumentais.

BIBLIOGRAFIA:

1. Skoog, D. A.; West, D. M.; Holler, F. J.; Crouch, S. R. Fundamentos de Química Analítica. 8ª ed. Cengage Learning, 2006.
 2. Harris, D. C. Análise Química Quantitativa. 7ª ed. LTC, 2008.
 3. Hage, D. S.; Carr, J. D. Química Analítica e Análise Quantitativa. Pearson Prentice Hall, 2012.
 4. Butler, J. N. Ionic Equilibrium: Solubility and pH Calculations. John Wiley & Sons, 1998.
-

DISCIPLINA: QUÍMICA ANALÍTICA AVANÇADA II

EMENTA:

Introdução às principais técnicas analíticas fundamentadas na espectrometria atômica e suas aplicações: espectrometria de absorção atômica com chama e forno de grafite; geração química de vapor; espectrometria de emissão atômica por chama; espectrometria de emissão atômica com plasma indutivamente acoplado. Métodos cromatográficos e eletroforese capilar.

BIBLIOGRAFIA:

1. Skoog, D. A.; West, D. M.; Holler, F. J.; Crouch, S. R. Fundamentos de Química Analítica. 9ª ed. Cengage Learning, 2014.
 2. Araújo, H. Análise Instrumental – Uma Abordagem Prática. 1ª ed. LTC, 2021.
 3. Harris, D. C. Explorando a Química Analítica. 4ª ed. LTC, 2011.
 4. Collins, C. H.; Braga, G. L.; Bonato, P. S. Fundamentos de Cromatografia. Editora Unicamp, 2006.
 5. Lanças, F. M. Cromatografia Líquida Moderna: HPLC/CLAE. Editora Átomo, 2016.
 6. Welz, B.; Sperling, M. Atomic Absorption Spectrometry. 3rd ed. John Wiley & Sons, 2002.
 7. Zuvela, P. et al. Column characterization and selection systems in reversed-phase high performance liquid chromatography. Chem. Rev. 2019, 119, 3674–3729.
 8. Peluso, P.; Chankvetadze, B. Recognition in the Domain of Molecular Chirality: From Noncovalent Interactions to Separation of Enantiomers. Chem. Rev. 2022, 122, 13235–13400.
-

DISCIPLINA: QUÍMICA MEDICINAL

EMENTA:

1. Introdução à Química Medicinal: introdução, conceito; fundamentos sobre medicamentos: definições, formas, emprego, ação biológica, efeito placebo, metabolismo, interações, efeitos adversos.
2. Desenvolvimento de fármacos e modificação molecular: introdução; fontes modernas de medicamentos; gênese e desenvolvimento de fármacos; latenciação; substituição bioisotérica; relação estrutura-atividade (QSAR); hibridização; simplificação molecular; estereoquímica; princípios de síntese de fármacos.
3. Planejamento racional de fármacos: antídotos, antimetabólicos; inibidores de enzimas; anti-hipertensivos – inibidores da ECA.
4. Propriedades físico-químicas: solubilidade, pKa, log P.
5. Metabolismo de fármacos: tipos de reações metabólicas; reações de fase I e de fase II.

BIBLIOGRAFIA:

1. Barreiro, E. J.; Fraga, C. A. M. Química Medicinal: As Bases Moleculares da Ação dos Fármacos. 2ª ed. Artmed, 2008.
2. Thomas, G. Química Medicinal – Uma Introdução. Guanabara Koogan, 2010.
3. Gringauz, A. Introduction to Medicinal Chemistry. Wiley, 1996.
4. Wermuth, C. G. The Practice of Medicinal Chemistry. Academic Press, 1996.
5. Goodman & Gilman. The Pharmacological Basis of Therapeutics. 9th ed. McGraw-Hill, 1996.

DISCIPLINA: QUÍMICA MEDICINAL COMPUTACIONAL

EMENTA:

Compostos biologicamente ativos: descoberta, desenvolvimento, identificação e preparação; estudos de metabolismo; modo de ação molecular; relações estrutura-atividade (SAR); classes terapêuticas; lei brasileira de patentes; experimentos computacionais.

BIBLIOGRAFIA:

1. Patrick, G. L. An Introduction to Medicinal Chemistry. 6th ed. Oxford University Press, 2017.
2. Wermuth, C. G. The Practice of Medicinal Chemistry. 4th ed. Academic Press, 2015.
3. Oliveira, T. et al. Virtual Screening Algorithms in Drug Discovery: A Review Focused on Machine and Deep Learning Methods. *Drugs and Drug Candidates* 2023, 2, 311–334.

4. Maia, E. H. B. et al. Structure-Based Virtual Screening: From Classical to Artificial Intelligence. *Frontiers in Chemistry* 2020, 8, 1–18.
-

DISCIPLINA: QUÍMICA ORGÂNICA AVANÇADA I

EMENTA:

Ligação química e teoria estrutural. Aromaticidade. Estereoquímica e análise conformacional. Reatividade e estrutura. Ácidos e bases. Intermediários reativos. Abordagem mecanística e descritiva de reações orgânicas (substituição alifática e aromática, adição a ligações múltiplas, eliminação).

BIBLIOGRAFIA:

1. Carey, F. A.; Sundberg, R. J. *Advanced Organic Chemistry, Part A: Structure and Mechanism*. 5th ed. Springer, 2007.
 2. Carey, F. A.; Sundberg, R. J. *Advanced Organic Chemistry, Part B: Reactions and Synthesis*. 5th ed. Springer, 2007.
 3. Smith, M. B.; March, J. *Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure*. 6th ed. John Wiley & Sons, 2007.
 4. Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S.; Wothers, P. *Organic Chemistry*. Oxford University Press, 2001.
-

DISCIPLINA: QUÍMICA ORGÂNICA AVANÇADA II

EMENTA:

Mecanismos e métodos para determiná-los. Reações de adição, condensação e substituição à carbonila. Reações de oxidação e redução. Reações radicalares. Reações pericíclicas.

BIBLIOGRAFIA:

1. Carey, F. A.; Sundberg, R. J. *Advanced Organic Chemistry, Part A: Structure and Mechanism*. 5th ed. Springer, 2007.
2. Carey, F. A.; Sundberg, R. J. *Advanced Organic Chemistry, Part B: Reactions and Synthesis*. 5th ed. Springer, 2007.
3. Smith, M. B.; March, J. *Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure*. 6th ed. John Wiley & Sons, 2007.
4. Clayden, J.; Greeves, N.; Warren, S.; Wothers, P. *Organic Chemistry*. Oxford University Press, 2001.

DISCIPLINA: QUÍMICA QUÂNTICA

EMENTA:

Equação de Schrödinger. Operadores lineares. Sistemas simples: partícula na caixa, rotor rígido, oscilador harmônico. Soluções de equações diferenciais por séries de potências. Postulados da mecânica quântica. Espaços vetoriais de dimensão infinita. Átomo de hidrogênio. Antissimetria; determinante de Slater. Átomos multieletrônicos. Moléculas. Método de Hartree-Fock.

BIBLIOGRAFIA:

1. Levine, I. N. Quantum Chemistry. 7th ed. Pearson, 2014.
2. Shankar, R. Principles of Quantum Mechanics. 2nd ed. Springer, 1994.
3. Atkins, P. W.; Friedman, R. Molecular Quantum Mechanics. 5th ed. Oxford University Press, 2011.
4. Magnasco, V. Elementary Methods of Molecular Quantum Mechanics. Elsevier, 2007.
5. Cohen-Tannoudji, C.; Diu, B.; Laloë, F. Quantum Mechanics, Vol. 1. 2nd ed. Wiley-VCH, 2020.
6. McArdle, S.; Endo, S.; Aspuru-Guzik, A.; Benjamin, S. C.; Yuan, X. Quantum computational chemistry. Rev. Mod. Phys. 2020, 92, 015003.

DISCIPLINA: QUÍMICA INORGÂNICA AVANÇADA I

EMENTA:

Conceitos modernos de ácidos e bases. Teoria de grupos. Química de coordenação: teorias de ligações, estrutura, reações, cinética e mecanismos. Química organometálica. Química inorgânica em sistemas biológicos.

BIBLIOGRAFIA:

1. Huheey, J. E.; Keiter, E. A.; Keiter, R. L. Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity. 4th ed. Harper Collins, 2008.
2. Moeller, T. Inorganic Chemistry: An Advanced Textbook. John Wiley & Sons, 2002.
3. Interrante, L. V.; Hampden-Smith, M. J. (eds.). Chemistry of Advanced Materials: An Overview. Wiley-VCH, 1998.
4. Konnerth, H. et al. Metal-organic framework (MOF)-derived catalysts for fine chemical production. Coord. Chem. Rev. 2020, 416.

- Roy, G. et al. Ferrocene as an iconic redox marker: From solution chemistry to molecular electronic devices. *Coord. Chem. Rev.* 2022, 473.
-

DISCIPLINA: QUÍMICA INORGÂNICA AVANÇADA II

EMENTA:

Espectroscopia e técnicas físico-químicas de caracterização de complexos e materiais: espectroscopia vibracional (infravermelho, Raman, Raman ressonante), espectroscopia eletrônica, fluorescência e fosforescência, introdução à espectroscopia de ressonância paramagnética eletrônica.

BIBLIOGRAFIA:

- Lever, A. B. P. *Inorganic Electronic Spectroscopy*. Elsevier, 1968.
 - Drago, R. S. *Physical Methods in Inorganic Chemistry*. Van Nostrand Reinhold, 1965.
 - Nascimento, A. B. *Elementos da Teoria de Grupo*. UFPB, 1981.
 - Cotton, F. A. *Chemical Applications of Group Theory*. 3rd ed. Wiley-Interscience, 1990.
 - Banwell, C. N. *Fundamentals of Molecular Spectroscopy*. 3rd ed. McGraw-Hill, 1983.
 - Orchin, M.; Jaffe, H. H. *Symmetry in Chemistry*. Courier Corporation, 2013.
-

DISCIPLINA: SÍNTESE ORGÂNICA

EMENTA:

Metodologia de síntese orgânica. Seletividade reacional e grupos de proteção. Estereocontrole em sistemas cíclicos, policíclicos e acíclicos. Estratégias em síntese orgânica. Desconexão e análise retrossintética. Interconversão de grupos funcionais. Síntese de moléculas simples e complexas.

BIBLIOGRAFIA:

- Nicolaou, K. C.; Chen, J. S. *Classics in Total Synthesis III: Further Targets, Strategies, Methods*. Wiley-VCH, 2011.
 - Warren, S.; Wyatt, P. *Organic Synthesis: The Disconnection Approach*. 2nd ed. Wiley, 2009.
 - Smith, M. B. *Organic Synthesis*. 3rd ed. Academic Press, 2011.
-

DISCIPLINA: TERMODINÂMICA ESTATÍSTICA

EMENTA:

Relações fundamentais da termodinâmica. Postulados da mecânica estatística e teoria dos ensembles. Ensembles canônico, microcanônico, grand-canônico e isotérmico-isobárico. Flutuações. Gases ideais e funções de partição molecular (translacional, rotacional, vibracional e eletrônica). Mecânica estatística clássica. Equilíbrio químico. Sólidos. Noções de sistemas líquidos.

BIBLIOGRAFIA:

1. McQuarrie, D. A. Statistical Mechanics. University Science Books, 2000.
 2. Tuckerman, M. E. Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation. Oxford University Press, 2010.
 3. Pathria, R. K.; Beale, P. D. Statistical Mechanics. Elsevier, 2012.
 4. Allen, M. P.; Tildesley, D. J. Computer Simulation of Liquids. 2nd ed. Oxford University Press, 2017.
-

DISCIPLINA: TÓPICOS EM QUÍMICA I

EMENTA:

Temas diversos e atuais em química, relacionados a uma área de pesquisa e domínio do docente.

BIBLIOGRAFIA:

1. Diversa, dependendo do tema.
-

DISCIPLINA: TÓPICOS EM QUÍMICA III

EMENTA:

Temas diversos e atuais em química, relacionados a uma área de pesquisa e domínio do docente.

BIBLIOGRAFIA:

1. Diversa, dependendo do tema.
-