



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC903 **Carga Horária** 90 **Créditos:** 6
Nome: MÉTODOS MULTIVARIADOS DE CALIBRAÇÃO

Objetivos

Conteúdo Programático

Conteúdo programático

I. Conceitos básicos e aspectos metodológicos:

Histórico e classificação dos métodos de calibração, operações com matrizes

II. Análise de componentes principais:

Representação de uma matriz de dados, o espaço das variáveis, o primeiro componente principal, componentes principais de ordem superior, mapa das amostras, mapa das variáveis, resíduos. Aplicações de análise por PCA.

III. Regressão por componentes principais:

MLR, PCR, PLS1, PLS2, exemplos e aplicações práticas.

Bibliografia

1. ESBENSEN, K.; Multivariate Analysis - in practice, CAMO, 1998
2. MARTENS H. & NAES, T. Multivariate Calibration, Wiley, 1991
3. ADAMS, J. Chemometrics in analytical spectroscopy, RSC, Analytica Spectroscopy Monographs. The Royal Society of Chemistry, 1995
4. MORGAN, E. CHEMOMETRICS: Experimental Design. John Wiley & Sons, 1991.
5. BARROS NETO, B.; SCARMINIO, I. E. & BRUNS, R. E. Planejamento e otimização de experimentos. Editora da UNICAMP, 1995.
6. MILLER, J. Statistics And Chemometrics For Analytical Chemistry, PRENTICE-HALL INTERNATIONAL, 2005
7. Artigos atuais de revisão da literatura



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC904 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: QUÍMICA AMBIENTAL

Objetivos

Conteúdo Programático

Conteúdo programático

I - Elementos de Química Ambiental

Introdução à história química do planeta.

Ciclos biogeoquímicos.

Elementos maiores da matéria animada.

Elementos menores.

Compostos orgânicos potencialmente tóxicos.

II - Principais problemas ambientais.

Causas da Poluição ambiental.

Aspectos de toxicologia geral.

Poluição ambiental natural e antropogênica.

Poluição do ar, águas, solo, por resíduos sólidos, por pesticidas.

Radioatividade.

Bibliografia

1. FREHSE, H. Pesticide Chemistry, VCH 1991
2. MAMANTOV G. & POPOV A., I. Chemistry of nonaqueous solutions, current progress, VCH, 1994
3. BAIRD, C. Química Ambiental. 2ª ed. Porto Alegre: Bookman, 2002.
4. BARCELÓ, D. & HENNION, M. C. Trace determination of pesticides and their degradation products in water. 2ª ed., Elsevier, Amsterdam, 2003.
5. REEVE, R.N. Environmental analysis: analytical chemistry by open learning. Editor John D. Barnes. Chichester (Inglaterra): ACOI / John Wiley, 1994.
6. BUNCE, N.J. Introduction to environmental chemistry. Wuerz Publishing Ltd, Winnipeg, 1993.
7. BUNCE, N. J. "Environmental Chemistry". 2ª ed. Wuerz Publishing Ltd, Winnipeg, 1994.
8. MANAHAN, S.E. "Environmental Science and Technology". Lewis Publishers, New York, 1997.
9. MANAHAN, S.E. Environmental Chemistry. Lewis Publishers, 1994.
10. Artigos atuais de revisão da literatura especializada.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC924 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: ORBITAIS MOLECULARES EM REAÇÕES ORGÂNICAS CLÁSSICAS

Objetivos

Conteúdo Programático

Programa

- I. Orbital Molecular e Orbital de Fronteira
- II. Teoria da Perturbação e Estado de Transição
- III. Reações Iônicas
- IV. Princípio de ácido e base duro e mole
- V. Nucleófilos Ambidentados: Nucleófilos carregados
- VI. Substituição Eletrofílica Aromática : Benzeno C-; X e Z substituído.
- VII. Eletrófilos Ambidentados:
- VIII. Eletrófilos Aromáticos, Alifáticos.
- IX. Controle Estereoeletrônico em Reações Orgânicas.
- X. Energia e coeficientes de OF
- XI. Reações de Ciclo Adição
- XII. Rearranjos Moleculares
- XIII. Exercícios.

Bibliografia

1. F.A. Carey, R.J. Sundberg, *Advanced Organic Chemistry*. Part A: *Structure and Mechanism*; Part B: *Reactions and Synthesis*. 3rd. Edition, Plenum Press, New York, 1990.
2. Woodward-Hoffmann Theory - Chapter 4
Thermal Pericyclic Reactions. R. B. Woodward and R. Hoffmann, *The Conservation of Orbital Symmetry*, Verlag Chemie, Weinheim, 1970.
3. Frontier Molecular Orbital Theory: I. Fleming, *Frontier Orbitals and Organic Chemical Reactions*, John-Wiley and Sons, New York, 1976.
4. Dewar-Zimmerman Theory: T. H. Lowry and K. S. Richardson, *Mechanism and Theory in Organic Chemistry*, 3rd Ed., Harper & Row, New York, 1987.
5. R. E. Lehr and A. P. Marchand, *Orbital Symmetry: A Problem Solving Approach*, Academic Press, New York, 1972.
6. Artigos e Revisões da Literatura atual.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC953 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: COLÓIDES E INTERFACES

Objetivos

Conteúdo Programático

Programa

UNIDADE 1 - O ESTADO COLOIDAL

- 1.1 - Introdução
- 1.2 - Classificação
- 1.3 - Características
- 1.4 - Preparação de colóides orgânicos, inorgânicos e híbridos

UNIDADE 2 - INTERFACES

- 2.1 - Definição
- 2.2 - Interface líquido-gás e líquido-líquido
- 2.3 - Interface sólido-gás
- 2.4 - Interface sólido-líquido
- 2.5 - Interfaces carregadas

UNIDADE 3 - PROPRIEDADES DINÂMICAS DE COLÓIDES

- 3.1 - Movimento de partículas em meio aquoso
- 3.2 - Movimento browniano e difusão translacional
- 3.3 - Ultracentrifugação
- 3.4 - Pressão osmótica

UNIDADE 4 - PROPRIEDADES ÓTICAS DE COLÓIDES

- 4.1 - Microscopia ótica e eletrônica
- 4.2 - Espalhamento de luz

UNIDADE 5 - PROPRIEDADES ELÉTRICAS DE COLÓIDES

- 5.1 - A dupla camada elétrica
- 5.2 - Fenômenos eletrocinéticos

UNIDADE 6 - ESTABILIDADE E INSTABILIDADE DE COLÓIDES

- 6.1 - Controle da estabilidade
- 6.2 - Coagulação x Floculação

UNIDADE 7 - FÍSICO-QUÍMICA DE COLÓIDES LIOFÍLICOS E LIOFÓBICOS

UNIDADE 8 - MEDIDAS DE TENSÃO INTERFACIAL E SUPERFICIAL

- 6.1 - Ângulo de contato e molhabilidade
- 6.2 - Método do anel
- 6.3 - Detergência

UNIDADE 9 - ENERGIA LIVRE DE SUPERFÍCIES DE SOLUÇÕES

UNIDADE 10 - ISOTERMAS DE ADSORÇÃO

UNIDADE 11 - COMPORTAMENTO REOLÓGICO

- 11.1 - Introdução
- 11.2 - Viscosidade
- 11.3 - Fluxo não-newtoniano
- 11.4 - Viscoelasticidade

Bibliografia

1. ADAMSON, A. W.; GAST, A. P. Physical chemistry of surfaces. 6th ed. New York: Wiley Interscience, 1997.
2. BARNES, G.T.; GENTLE, I.R. Interfacial Science, OUP, 2005.
3. COSGROVE, T. Colloid Science: Principles, Methods and Applications, Blackwell Publishing, 2005.
4. GOODWIN, J. W.; HUGHES, L. G., Rheology for Chemists: An Introduction. RSC Publishing: Cambridge, 2008
5. HUNTER, R. J. Zeta potential in colloid science: principles and applications. London: Academic Press, 1981.



6. MYERS, D. Surfaces, Interfaces, and Colloids: principles and applications. 2. ed., Wiley-VCH, 1999.
7. OUDAR, J. Physics and chemistry of surfaces. London: Bluchir, 1975.
8. SHAW, D. J. Introduction to colloid and surface chemistry. 3rd ed. London: Butterworths, 1980.
9. SCRHAMM, G. Reologia e Reometria. Fundamentos Teóricos e Práticos, Artliber, 2006.
10. SOMORJAI, A.G. Introduction to surface chemistry and catalysis. John Wiley & Sons, 1994.
11. Artigos científicos recentes publicados em periódicos da área sobre o tema.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC966 **Carga Horária** 30 **Créditos:** 2
Nome: SEMINÁRIOS I

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

1. LOCAL: A ser definido pelo presidente da banca
 2. DATA e HORÁRIO: Dia de semana e horário a ser definido pelo presidente da banca e de acordo com a disponibilidade de local.
 3. TEMA: A lista de tópicos deve ser fornecida pela banca examinadora e deve ser constituída de artigos de revisão publicados recentemente que abordem temas científicos inovadores e de relevância mundial. Os artigos de revisão deverão ser selecionados pela busca na literatura em periódicos de competência conhecida.
 4. DATA DE APRESENTAÇÃO E DEFINIÇÃO DE TEMA: A data de apresentação será definida na primeira reunião do semestre, por sorteio. O tema do seminário para cada mestrando será definido 02 (duas) semanas antes da data de apresentação. Os assuntos para cada mestrando também serão sorteados (por área de concentração).
 5. RESUMO DO SEMINÁRIO: Um resumo escrito do seminário deverá ser entregue a cada membro da banca examinadora, com uma semana de antecedência à data de apresentação.
Estrutura do Resumo (máximo de 05 (cinco) páginas tamanho A4, fonte Times New Roman 12 pontos e espaçamento entre linhas de 1,5):
1ª página: título do seminário, nome do mestrando, área de concentração, data de apresentação, autores e referência do artigo da revisão;
2ª - 5ª páginas: introdução, desenvolvimento (descrição do tópico a ser abordado), conclusões e referências bibliográficas.
 6. DIVULGAÇÃO: O título, breve resumo de um parágrafo, nome do apresentador, data, hora e local da apresentação deve ser fornecido à secretaria do PPGQ para divulgação uma semana antes da data da apresentação.
 7. APRESENTAÇÃO: O seminário será público, a apresentação deverá ficar restrita ao tempo de 30-40 minutos. Ao final da apresentação do seminário ocorrerá uma discussão sobre o tema abordado. Esta discussão será mediada pela banca examinadora e contará com a participação de todos os presentes no auditório. Também terá destaque especial na discussão dois *mestrandos debatedores* sorteados ao final da apresentação.
 8. AVALIAÇÃO: A avaliação do apresentador do seminário será feita por quatro professores pesquisadores, um de cada área de concentração do PPGQ, considerando os seguintes tópicos/critérios:
 - resumo escrito: estrutura, conteúdo e profundidade científica;
 - apresentação: estrutura, conteúdo, profundidade científica, conhecimento, clareza e tempo de apresentação;
 - discussão: conhecimento e profundidade científica.A banca deve elaborar os pesos de cada critério e divulgá-los aos discentes antes da primeira apresentação. Os critérios conhecimento e profundidade científica também serão utilizados para avaliar o desempenho dos dois *mestrandos debatedores* participantes da discussão.
- O conceito final será dado ao término de todos os seminários, através dos conceitos parciais atribuídos pela banca no dia da apresentação.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC967 **Carga Horária** 60 **Créditos:** 4
Nome: SEMINÁRIOS II

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

1. LOCAL: A ser definido pelo presidente da banca
 2. DATA e HORÁRIO: Dia de semana e horário a ser definido pelo presidente da banca e de acordo com a disponibilidade de local.
 3. TEMA: A lista de tópicos deve ser fornecida pela banca examinadora e deve ser constituída de artigos de revisão publicados recentemente que abordem temas científicos inovadores e de relevância mundial. Os artigos de revisão deverão ser selecionados pela busca na literatura em periódicos de competência conhecida.
 4. DATA DE APRESENTAÇÃO E DEFINIÇÃO DE TEMA: A data de apresentação será definida na primeira reunião do semestre, por sorteio. O tema do seminário para cada doutorando será definido 02 (duas) semanas antes da data de apresentação. Os assuntos para cada doutorando também serão sorteados (por área de concentração).
 5. RESUMO DO SEMINÁRIO: Um resumo escrito do seminário deverá ser entregue a cada membro da banca examinadora, com uma semana de antecedência à data de apresentação.
Estrutura do Resumo (máximo de 05 (cinco) páginas tamanho A4, fonte Times New Roman 12 pontos e espaçamento entre linhas de 1,5):
1ª página: título do seminário, nome do doutorando, área de concentração, data de apresentação, autores e referência do artigo da revisão;
2ª - 5ª páginas: introdução, desenvolvimento (descrição do tópico a ser abordado), conclusões e referências bibliográficas.
 6. DIVULGAÇÃO: O título, breve resumo de um parágrafo, nome do apresentador, data, hora e local da apresentação deve ser fornecido à secretaria do PPGQ para divulgação uma semana antes da data da apresentação.
 7. APRESENTAÇÃO: O seminário será público, a apresentação deverá ficar restrita ao tempo de 40-50 minutos. Ao final da apresentação do seminário ocorrerá uma discussão sobre o tema abordado. Esta discussão será mediada pela banca examinadora e contará com a participação de todos os presentes no auditório. Também terá destaque especial na discussão dois *doutorandos debatedores* sorteados ao final da apresentação.
 8. AVALIAÇÃO: A avaliação do apresentador do seminário será feita por quatro professores pesquisadores, um de cada área de concentração do PPGQ, considerando os seguintes tópicos/critérios:
 - resumo escrito: estrutura, conteúdo e profundidade científica;
 - apresentação: estrutura, conteúdo, profundidade científica, conhecimento, clareza e tempo de apresentação;
 - discussão: conhecimento e profundidade científica.A banca deve elaborar os pesos de cada critério e divulgá-los aos discentes antes da primeira apresentação. Os critérios conhecimento e profundidade científica também serão utilizados para avaliar o desempenho dos dois *doutorandos debatedores* participantes da discussão.
- O conceito final será dado ao término de todos os seminários, através dos conceitos parciais atribuídos pela banca no dia da apresentação.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC968 **Carga Horária** 30 **Créditos:** 2
Nome: DOCÊNCIA ORIENTADA - MESTRADO

Objetivos

Conteúdo Programático

BIBLIOGRAFIA

Indicada pelo docente responsável da disciplina.



Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC969 **Carga Horária** 60 **Créditos:** 4
Nome: DOCÊNCIA ORIENTADA - DOUTORADO

Objetivos

Conteúdo Programático

BIBLIOGRAFIA

Indicada pelo docente responsável da disciplina.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC970 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: MÉTODO CIENTÍFICO E ÉTICA

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - Breve HISTÓRICO DO MÉTODO CIENTÍFICO

1.1 - Desenvolvimento do método científico desde Aristóteles até Descartes

UNIDADE 2 - O MÉTODO CARTESIANO

2.1 - Princípios do Método
2.2 - Método Indutivo e Dedutivo

UNIDADE 3 - O MÉTODO CIENTÍFICO MODERNO

3.1 - Karl Popper, o problema da demarcação e a falseabilidade das hipóteses
3.2. Thomas Kuhn estabelecimento de paradigmas e a evolução científica

UNIDADE 4 - ÉTICA

4.1 - Conceito e histórico
4.2 - Plágios, autoplágio e falsificação de dados
4.3 - Periódicos predatórios
4.4 - Confidencialidade

UNIDADE 5 - PLANEJAMENTO E PUBLICAÇÃO DA PESQUISA

5.1 - Elaboração de projetos de pesquisa
5.2 - Elaboração de artigo científico



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC971 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: TÓPICOS ESPECIAIS EM QUÍMICA ANALÍTICA I

Objetivos

Conteúdo Programático

BIBLIOGRAFIA

Artigos científicos recentes sobre o tema, publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC972 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: TÓPICOS ESPECIAIS EM QUÍMICA ANALÍTICA II

Objetivos

Conteúdo Programático

BIBLIOGRAFIA

Artigos científicos recentes sobre o tema, publicados em periódicos da área.

**Dados da Disciplina**

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC973 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: TÓPICOS ESPECIAIS EM QUÍMICA ANALÍTICA III

Objetivos**Conteúdo Programático****BIBLIOGRAFIA**

Artigos científicos recentes sobre o tema, publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC974 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: TÓPICOS ESPECIAIS EM QUÍMICA ANALÍTICA IV

Objetivos

Conteúdo Programático

BIBLIOGRAFIA

Artigos científicos recentes sobre o tema, publicados em periódicos da área.



Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC975 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: QUÍMICA ANALÍTICA AVANÇADA

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - CONCEITOS BÁSICOS E ASPECTOS METODOLÓGICOS

- 1.1 - Marcha geral de análise
- 1.2 - Métodos não instrumentais de análise
- 1.3 - Métodos instrumentais de análise

UNIDADE 2 - ANÁLISE DE TRAÇOS

- 2.1 - Aspectos metodológicos
- 2.2 - Materiais e equipamentos para a análise de traços
- 2.3 - Coleta e preparo de amostras
- 2.4 - Aplicabilidade da análise de traços

UNIDADE 3 - SOLUÇÕES

- 3.1 - Teoria de Debye-Hückel: força iônica e atividade, leis de Debye-Hückel (limite e estendida), coeficiente de atividade em força iônica alta, coeficiente de atividade de não eletrólitos, constante de equilíbrio e coeficiente de atividade
- 3.2 - Solventes não aquosos: propriedades dos solventes, classificação, equilíbrios ácido-base em meios não aquosos, potencial elétrico e condutividade em meios não aquosos

UNIDADE 4 - EQUILÍBRIO ÁCIDO-BASE

- 4.1 - Ácidos e bases monopróticos
- 4.2 - Ácidos e bases polifuncionais (distribuição das espécies)
- 4.3 - Representação gráfica do equilíbrio ácido-base

UNIDADE 5 - EQUILÍBRIO DE SOLUBILIDADE

- 5.1 - Influência de diversos fatores no equilíbrio (pH, íon comum, outros íons, hidrólise)

UNIDADE 6 - Equilíbrio de complexação

- 6.1 - Distribuição das espécies no equilíbrio
- 6.2 - Constantes de formação
- 6.3 - Influência do pH nos equilíbrios de complexação
- 6.4 - Equilíbrio de complexação e solubilidade

UNIDADE 7 - EQUILÍBRIO REDOX

- 7.1 - Mecanismos de reações de oxi-redução
- 7.2 - Espontaneidade das reações de oxi-redução
- 7.3 - Equilíbrios simultâneos envolvendo oxi-redução, ácido-base, complexação e solubilidade

BIBLIOGRAFIA

- SCHWEDT, G.; The Essential Guide to Analytical Chemistry, Wiley, Chichester, 1997.
- SKOOG D. A.; HOLLER, F. J.; NIEMAN, T. A.; Princípios de Análise Instrumental. 6a Ed., Bookman, Porto Alegre, 2009.
- HARRIS, D. C.; Análise Química Quantitativa, 8ª Ed., LTC, São Paulo, 2012.
- REEVE, R. N.; Environmental Analysis. Analytical Chemistry by Open Learning, Wiley, Chichester, 1994.
- SKOOG, A.; WEST, D. M.; HOLLER, F. J.; CROUCH, S. R.; Fundamentos de Química Analítica, 8ª Ed., Thomson, São Paulo, 2005.
- VALCÁRCEL, M.; Principles of Analytical Chemistry, Springer-Verlag, New York, 2000.
- ROBINSON, R. A.; STOKES, R. H.; Electrolyte Solutions, 5th Ed., Butterworths & Co, London, 1970.
- MEITES, L.; Chemical Equilibrium and Kinetics, Pergamon International Library, Oxford, 1989.
- PETERS, D. G.; HAYES, J. M.; HIEFTJE, G. M.; Chemical Separations and Measurements, Saunders, Philadelphia, 1974.
- POPOVYCH, O.; TOMKINS, R. P. T.; Nonaqueous Solution Chemistry, John Wiley & Sons, New Jersey, 1981.



R. KELLNER, J. M. MERMET, M. OTTO, H. M. WIDMER, Analytical Chemistry, Wiley-VCH, Weinheim, 1998.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC976 **Carga Horária** 90 **Créditos:** 6
Nome: MÉTODOS INSTRUMENTAIS EM QUÍMICA ANALÍTICA

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - TRATAMENTO ESTATÍSTICO DE DADOS

- 1.1 - Erros em análises químicas
- 1.2 - Tratamento e avaliação estatística dos dados: média, mediana e intervalo de confiança
- 1.3 - Teste de hipóteses: teste t, teste F e ANOVA
- 1.4 - Detecção de valores anômalos
- 1.5 - Calibração em procedimentos analíticos
- 1.6 - Limite de detecção e quantificação em Química Analítica

UNIDADE 2 - MÉTODOS ESPECTROMÉTRICOS

- 2.1 - Interação entre radiação e matéria
- 2.2 - Espectro eletromagnético atômico e molecular
- 2.3 - Espectrometria de absorção molecular UV-Vis
- 2.4 - Espectrometria de absorção atômica
- 2.5 - Técnicas com plasma indutivamente acoplado
- 2.6 - Espectrometria de emissão óptica com plasma induzido por laser

UNIDADE 3 - MÉTODOS DE SEPARAÇÃO

- 3.1 - Aspectos básicos em cromatografia
- 3.2 - Classificação de métodos cromatográficos
- 3.3 - Cromatografia a gás
- 3.4 - Cromatografia a líquido
- 3.5 - Instrumentação em cromatografia
- 3.6 - Tratamento dos dados cromatográficos
- 3.7 - Aplicações e técnicas cromatográficas especiais
- 3.8 - Eletroforese capilar: Conceitos básicos; Mecanismos de separação; Instrumentação e aplicações

UNIDADE 4 - MÉTODOS ELETROQUÍMICOS

- 4.1 - Aspectos básicos em eletroquímica
- 4.2 - Classificação de métodos eletroquímicos
- 4.3 - Potenciometria
- 4.4 - Condutometria
- 4.5 - Voltametria
- 4.6 - Polarografia
- 4.7 - Coulometria

BIBLIOGRAFIA

- SKOOG D. A.; HOLLER, F. J.; NIEMAN, T. A.; Princípios de Análise Instrumental, 6a Ed., Bookman, Porto Alegre, 2009.
- SKOOG, D. A.; WEST, D. M.; HOLLER, F. J.; CROUCH, S. R.; Fundamentos de Química Analítica, 8a Ed., Cengage Learning, São Paulo, 2009.
- MILLER, J. N.; MILLER, J. C.; Statistics and Chemometrics for Analytical Chemistry, 5th Ed., Pearson Prentice Hall, Gosport, 2004.
- SCHOLZ, F.; Electroanalytical Methods - Guide to Experiments and Applications, Springer-Verlag, Berlin, 2010.
- WANG, J.; Analytical Electrochemistry, 3rd Ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2006.
- SOMMER, L.; Analytical Absorption Spectrophotometry in the Visible and Ultraviolet, Elsevier, Amsterdam, 1989.
- WELZ, B.; SPERLING, M.; Atomic Absorption Spectrometry, Wiley-VCH, Weinheim, 1999.
- HADDAD, P. R.; JACKSON, P. E.; Ion Chromatography, Elsevier, Amsterdam, 1990.
- FOWLIS, I. A.; Gas Chromatography - Analytical Chemistry by Open Learning, 2nd Ed., ACOL/Wiley, Chichester, 1995.
- MEYER, V. R.; Practical High-Performance Liquid Chromatography, 2nd Ed., John Wiley & Sons, Chichester, 1993.
- CIOLA, R.; Fundamentos da Cromatografia Líquido de Alto Desempenho, Edgard Blücher, São Paulo, 1998.



LANÇAS, F. M.; Cromatografia em Fase Gasosa, ACTA, São Carlos, 1993.

KUHN, R.; HOFFSTETTER-KUHN, S.; Capillary Electrophoresis: Principles and Practice, Springer Laboratory, Berlin, 1993.

KOK, W.; Chromatographia - Capillary Electrophoresis: Instrumentation and Operation, Vol. 51, Vieweg+Teubner Verlag, Braunschweig, 2000.

DEMING, S.; MORGAN, S. L.; Experimental Design: A Chemometric Approach, Elsevier, Amsterdam, 1987.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC977 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: PREPARO DE AMOSTRAS

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - CONCEITOS GERAIS

- 1.1 - Conceitos da amostragem e preparo de amostras
- 1.2 - Etapas de uma análise química
- 1.3 - Procedimentos de amostragem: sólidos, líquidos e gases

UNIDADE 2 - PREPARO DE AMOSTRAS PARA DETERMINAÇÃO ELEMENTAR

- 2.1 - Fundamentos sobre preparo de amostras para análise elementar
- 2.2 - Decomposição por fusão
- 2.3 - Decomposição por via úmida: sistemas abertos e fechados com aquecimento convencional ou micro-ondas
- 2.4 - Decomposição por combustão: sistemas abertos, sistemas fechados e sistemas dinâmicos
- 2.5 - Métodos alternativos de decomposição. Vantagens e limitações dos métodos de decomposição

UNIDADE 3 - PREPARO DE AMOSTRAS PARA DETERMINAÇÃO DE COMPOSTOS ORGÂNICOS

- 3.1 - Fundamentos sobre o preparo de amostras para determinação de compostos orgânicos
- 3.2 - Métodos clássicos de preparo de amostras: extração líquido-líquido, Soxhlet, ultrassom, micro-ondas, agitação mecânica, entre outros
- 3.3 - Métodos modernos de preparo de amostras: extração em fase sólida, microextração em fase sólida, microextração líquido-líquido dispersiva, microextração em fase líquida, extração com fluido supercrítico, extração acelerada por solvente, extração sortiva em barra de agitação, QuEChERS, entre outros
- 3.4 - Aplicações de métodos de extração em análises químicas

UNIDADE 4 - PREPARO DE AMOSTRAS PARA ANÁLISE DE ESPECIAÇÃO

BIBLIOGRAFIA

KRUG, F. J.; Métodos de Preparo de Amostras - Fundamentos Sobre Preparo de Amostras Orgânicas e Inorgânicas para Análise Elementar, 1ª Ed., Seção Técnica de Biblioteca - CENA/USP, Piracicaba, 2010.

FLORES, E. M. M.; Microwave-Assisted Sample Preparation for Trace Element Determination, 1st Ed., Elsevier, Amsterdam, 2014.

ANDERSON, R.; Sample Pretreatment and Separation. Analytical Chemistry by Open Learning, John Wiley & Sons, Chichester, 1991.

ARRUDA, M. A. Z.; Trends in Sample Preparation, Nova Science Publishers, Hauppauge, 2006.

(Skip) KINGSTON, H. M.; HASWELL, S. J.; Microwave-Enhanced Chemistry. Fundamentals, Sample Preparation, and Applications, American Chemical Society, Washington, 1997.

MESTER, Z.; STURGEON, R. E.; Sample Preparation for Trace Element Analysis, Elsevier, Amsterdam, 2003.

IYENGAR, G. V.; SUBRAMANIAN, K. S.; WOITTIEZ, J. R. W.; Element Analysis of Biological Samples - Principles and Practice, CRC Press, Boca Raton, 1997.

STOEPLER, M.; Sampling and Sample Preparation: Practical Guide for Analytical Chemistry, Springer-Verlag, Berlin, 1997.

SULCEK, Z.; POVONDRA, P.; Methods of Decomposition in Inorganic Analysis, CRC Press, Boca Raton, 1989.

MITRA, S.; Sample Preparation Techniques in Analytical Chemistry, John Wiley & Sons, Hoboken, 2003.

MOLDOVEANU, S. C.; DAVID, V.; Sample Preparation in Chromatography, Vol. 65, 1st Ed., Elsevier, Amsterdam, 2002.

SIMPSON, N. J. K.; Solid-Phase Extraction: Principles, Techniques, and Applications, 1st Ed., CRC Press, New York, 2000.

FIGUEIREDO, E. C.; BORGES, K. B.; QUEIROZ, M. E.; Preparo de Amostras para Análise de Compostos Orgânicos. LTC, Rio de Janeiro, 2015.

CORNELIS, R.; CARUSO, J.; CREWS, H.; HEUMANN, K. G.; Handbook of Elemental Speciation: Techniques and Methodology, John Wiley & Sons, Chichester, 2003.



CORNELIS, R.; CREWS, H.; CARUSO, J.; HEUMANN, K. G.; Handbook of Elemental Speciation II: Species in the Environment, Food, Medicine & Occupational Health, John Wiley & Sons, Chichester, 2005.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC978 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: QUÍMICA ANALÍTICA DE PROCESSOS

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - QUÍMICA ANALÍTICA DE PROCESSOS (PAC)

- 1.1 - Introdução e perspectiva histórica
- 1.2 - Tecnologia Analítica de Processos (PAT): implementação e objetivos
- 1.3 - O processo analítico
- 1.4 - Métodos analíticos clássicos e instrumentais
- 1.5 - Analisadores de processo: princípios de medida
- 1.6 - Ferramentas de tratamento de dados
- 1.7 - Implementação na produção e rotina

UNIDADE 2 - ANALISADORES DE PROCESSO

- 2.1 - Aplicação: controle de qualidade, controle de processo e monitoramento ambiental e de segurança
- 2.2 - Sistema de medição: "off-line", "at-line", "on-line", "in-line" e "non-invasive"

UNIDADE 3 - QUÍMICA ANALÍTICA DE PROCESSOS APLICADA À INDÚSTRIA

- 3.1 - Sensores
- 3.2 - Cromatografia
- 3.3 - Espectroscopia na região do infravermelho e imagem
- 3.4 - Espectroscopia UV-visível e de fluorescência
- 3.5 - Espectrometria de massa
- 3.6 - Ressonância magnética nuclear
- 3.7 - Métodos térmicos
- 3.8 - Outros

BIBLIOGRAFIA

SKOOG, D. A.; WEST, D. M.; HOLLER F. J.; CROUCH, S. R; Fundamentos de Química Analítica, Tradução da 8a Ed. norte-americana, Cengage Learning, São Paulo, 2005.

SKOOG D. A.; HOLLER, F. J.; NIEMAN, T. A.; Princípios de Análise Instrumental, 5a Ed., Bookman, Porto Alegre, 2002.

BAKEEV, K. A.; Process Analytical Technology, Backwell, 2005.

HARRIS, D. C.; Exploring Chemical Analysis, 5th Ed., W. H. Freeman and Company, New York, 2013.

CHEW, W.; SHARRATT, P.; Trends in Process Analytical Technology, Anal. Methods 2 (2010) 1412-1438.

WORKMAN, J. JR.; KOCH, M.; VELTKAMP, D.; Process Analytical Chemistry, Anal. Chem. 79 (2007) 4345-4364.

Artigos científicos recentes sobre o tema, publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC979 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: FUNDAMENTOS DE MICRO-ONDAS E ULTRASSOM PARA PROCESSOS QUÍMICOS

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - ONDULATÓRIA: REVISÃO

UNIDADE 2 - radiação micro-ondas: fundamentos

- 1
- 2
- 2.1 - O espectro de radiação eletromagnética ionizante e não ionizante
- 2.2 - Interação da radiação micro-ondas com a matéria: polarização elétrica e magnética
- 2.3 - Dependência das propriedades dielétricas dos materiais com a temperatura
- 2.4 - Peculiaridades do aquecimento micro-ondas: aquecimento seletivo; tempo de relaxação dielétrico; profundidade de penetração da onda
- 2.5 - Efeitos térmicos e não térmicos da radiação micro-ondas

UNIDADE 3 - equipamentos de micro-ondas

- 3.1 - Geradores de micro-ondas: válvula Magnetron
- 3.2 - Guia de ondas e aplicadores monomodo e multimodo

UNIDADE 4 - aplicação da radiação micro-ondas para processos QUÍMICOS

- 4.1 - Processos de secagem e descongelamento
- 4.2 - Processos de extração
- 4.3 - Indústria de polímeros
- 4.4 - Indústria de cerâmicas
- 4.5 - Aplicações ambientais
- 4.6 - Catálise

UNIDADE 5 - Energia ultrassônica: fundamentos

- 5.1 - Faixas de frequência do som
- 5.2 - Intensidade de pressão acústica e amplitude
- 5.3 - Absorção do som
- 5.4 - Formação de bolhas e fatores que afetam o fenômeno de cavitação
- 5.5 - Movimentação da bolha e aplicação no campo acústico

UNIDADE 6 - equipamentos de ultrassom

- 6.1 - Geração de ultrassom: piezoelectricidade
- 6.2 - Banhos de ultrassom
- 6.3 - Sonda de ultrassom de imersão direta
- 6.4 - Sistemas de baixa intensidade
- 6.5 - Sistemas de alta intensidade

UNIDADE 7 - aplicação da energia ultrassônica para processos QUÍMICOS

- 7.1 - Processamento e preservação de alimentos
- 7.2 - Biotecnologia
- 7.3 - Síntese
- 7.4 - Indústria têxtil
- 7.5 - Extração
- 7.6 - Sonocristalização
- 7.7 - Solda metálica e plástica
- 7.8 - Indústria do petróleo
- 7.9 - Outros processos (filtração, separação e limpeza)
- 7.10 - Proteção e correção de danos ambientais

BIBLIOGRAFIA

RESNICK, R.; HALLIDAY, D.; WALKER, J.; Fundamentos de Física, Vol. 1, 2, 3 e 4, 9ª Ed., LTC, São Paulo, 2012.

ATKINS, P. W.; Físico-Química, Vol. 1 e 2, 9ª Ed., LTC, São Paulo, 2012.

STEIN, D. F.; Microwave Processing of Materials, National Academy Press, Washington, 1994.

Autenticação: 55E2.AB98.EF4B.1DED.BDBA.3647.9731.BF1C consulte em <http://www.ufsm.br/autenticacao>

Detalhes do documento em <http://portal.ufsm.br/documentos>



CHEN, D.; SHARMA, S. K.; MUDHOO, A.; Handbook on Applications on Ultrasound: Sonochemistry for Sustainability, CRC Press, Boca Raton, 2012.

MASON, T. J.; LORIMER, J. P.; Applied Sonochemistry: Uses of Power Ultrasound in Chemistry and Processing, Wiley-VHC Verlag, Darmstadt, 2002.

KITCHEN, R.; RF and Microwave Radiation Safety Handbook, 2nd Ed., Newnes, 2001.

LARDHED, M.; OLOFSSON, K.; Microwave Methods in Organic Synthesis, Springer-Verlag, Berlin, 2006.

SCHUBERT, H.; REGIER, M.; The Microwave Processing of Foods, CRC Press, Chichester, 2005.

FENG, H.; BARBOSA-CÁNOVAS, G. V.; WEISS, J.; Ultrasound Technologies for Food and Bioprocessing, Springer, New York, 2011.

LUQUE DE CASTRO, M. D.; CAPOTE, F. P.; Analytical Applications of Ultrasound, Vol. 26, Elsevier, Amsterdam, 2007.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC980 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: ANÁLISE DE ESPECIAÇÃO QUÍMICA

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - ASPECTOS GERAIS RELACIONADOS COM A ANÁLISE DE ESPECIAÇÃO

- 1.1 - Conceitos fundamentais da análise de especiação química
- 1.2 - Aspectos ambientais e toxicológicos relacionados com as espécies dos elementos químicos
- 1.3 - Interferências nas técnicas empregadas para especiação
- 1.4 - Validação de métodos na análise de especiação
- 1.5 - Técnicas empregadas para a identificação e quantificação de espécies químicas

UNIDADE 2 - TRATAMENTO DA AMOSTRA

- 2.1 - Coleta de amostras para análise de especiação química
- 2.2 - Preservação de amostras para análise de especiação química
- 2.3 - Tratamento de amostras para análise de especiação química

UNIDADE 3 - TÉCNICAS NÃO CROMATOGRÁFICAS PARA ESPECIAÇÃO

- 3.1 - Extrações seletivas (líquido-líquido e sólido-líquido)
- 3.2 - Volatilização seletiva
- 3.3 - Eletroforese e "purge and trap"
- 3.4 - Técnicas empregadas para a identificação e quantificação: espectrometria de absorção atômica e emissão atômica e espectrometria de massa

UNIDADE 4 - TÉCNICAS CROMATOGRÁFICAS PARA ESPECIAÇÃO

- 4.1 - Emprego da cromatografia a líquido e cromatografia a gás para a separação de espécies químicas
- 4.2 - Acoplamento de cromatógrafos a líquido e a gás a espectrômetros de absorção, emissão e fluorescência atômica
- 4.3 - Acoplamento de cromatógrafos a líquido e a gás a espectrômetros de massa com plasma indutivamente acoplado (ICP-MS)
- 4.4 - Espectrometria de massa molecular na análise de especiação química
- 4.5 - Outras técnicas usadas como detectores na análise de especiação química

BIBLIOGRAFIA

BAKIRDERE, S.; Speciation Studies in Soil, Sediment and Environmental Samples, Taylor and Francis Group, New York, 2014.

CORNELIS, R.; CARUSO, J. A.; CREWS, H.; HEUMANN, K. G.; Handbook of Elemental Speciation: Techniques and Methodology, John Wiley & Sons, Chichester, 2003.

CORNELIS, R.; CREWS, H.; CARUSO, J. A.; HEUMANN, K. G.; Handbook of Elemental Speciation II: Species in the Environment, Food, Medicine & Occupational Health
John Wiley & Sons, Chichester, 2005.

CRAIG, P.; Organometallic Compounds in the Environment, 2nd Ed., John Wiley & Sons, Chichester, 2003.

EBDON, L.; PITTS, L.; CORNELIS, R.; CREWS, H.; DONARD, O. F. X.; QUEVAUVILLER, Ph.; Trace Element Speciation for Environment, Food and Health, RSC, Cambridge, 2001.

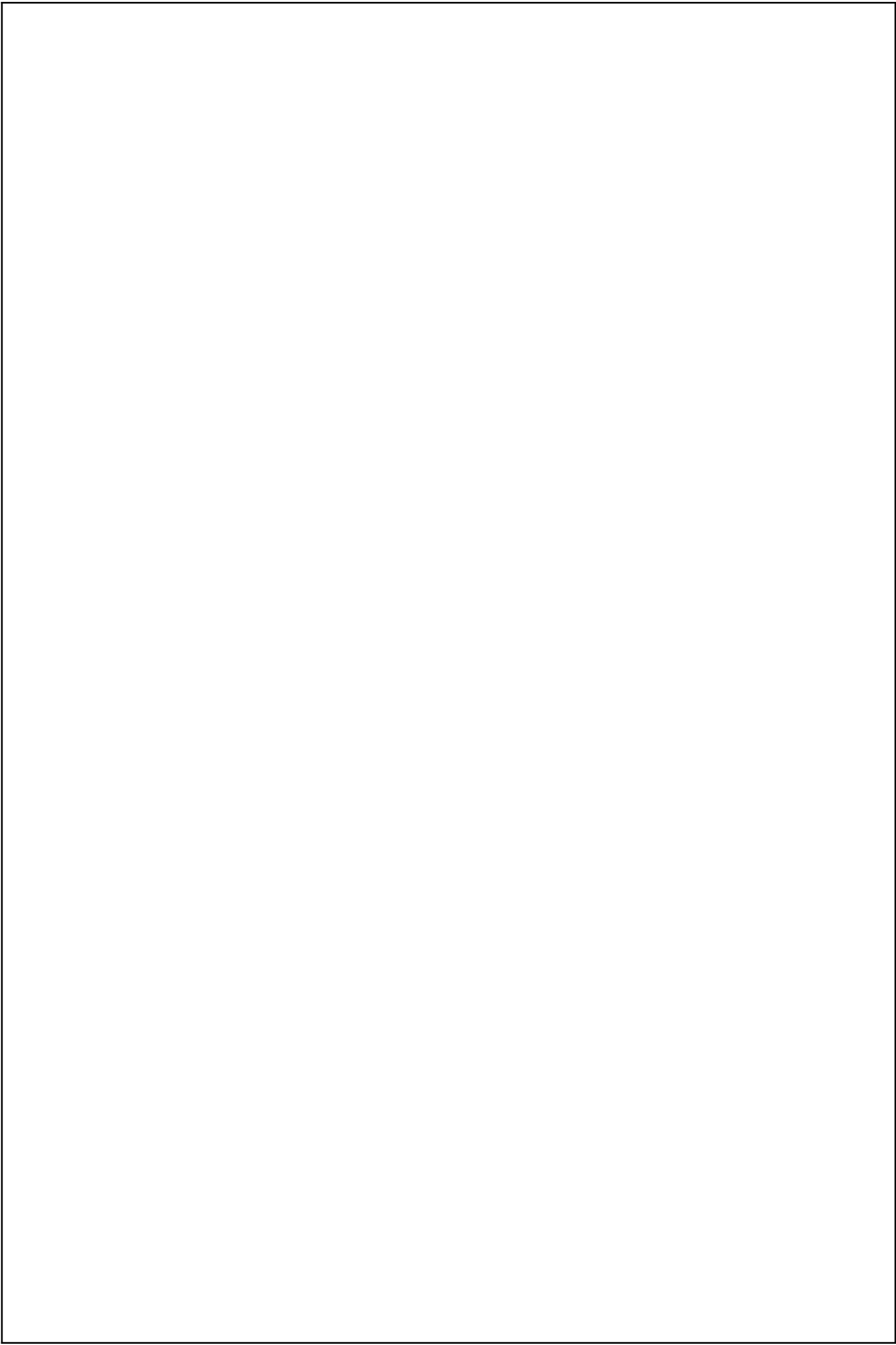
CARUSO, J. A.; SUTTON, K. L.; ACKLEY, K. L.; Elemental Speciation: New Approaches for Trace Element Analysis, Vol. 33, Elsevier, Amsterdam, 2000.

Szpunar, J.; Lobiński, R.; Hyphenated Techniques in Speciation Analysis, RSC, Cambridge, 2004.

Szpunar, J.; Lobiński, R.; Smith, M. R.; Hyphenated techniques in speciation analysis, RSC, Cambridge, 2003.

Ure, A.; Davidson, C.; Chemical Speciation in the Environment, 2nd Ed., Blackwell Science Ltd., Oxford, 2007.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.





Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC981 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: ANÁLISE DIRETA DE SÓLIDOS

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - ANÁLISE DIRETA DE SÓLIDOS POR ESPECTROMETRIA DE ABSORÇÃO ATÔMICA

- 1.1 - Características dos espectrômetros de absorção atômica empregados para análise de sólidos
- 1.2 - Atomização com chama e forno de grafite
- 1.3 - Sistemas para introdução da amostra na chama e no forno de grafite
- 1.4 - Uso de modificadores químicos em análise de sólidos
- 1.5 - Interferências espectrais e não espectrais da espectrometria de absorção atômica aplicada à análise direta de sólidos
- 1.6 - Corretores para absorção de radiação não específica
- 1.7 - Aplicação da técnica

UNIDADE 2 - ANÁLISE DIRETA DE SÓLIDOS POR ESPECTROMETRIA DE EMISSÃO ÓPTICA E ESPECTROMETRIA DE MASSA COM PLASMA INDUTIVAMENTE ACOPLADO

- 2.1 - Aspectos gerais sobre o emprego das técnicas de ICP OES e ICP-MS para a análise direta de sólidos, suspensões e soluções
- 2.2 - Acoplamento de vaporizadores eletrotérmicos (ETV) e laser à técnica de ICP OES e ICP-MS
- 2.3 - Características do transporte de vapor atômico até o plasma
- 2.4 - Uso de modificadores químicos em ETV
- 2.5 - Interferências espectrais e não espectrais nas técnicas de ETV-ICP OES e ETV-ICP-MS aplicada à análise direta de sólidos
- 2.6 - Outros dispositivos para a introdução de amostras sólidas e suspensões no plasma
- 2.7 - Aplicação das técnicas

UNIDADE 3 - OUTRAS TÉCNICAS DE ANÁLISE DIRETA DE SÓLIDOS

BIBLIOGRAFIA

KURFÜRST U.; Solid Sample Analysis. Direct and Slurry Sampling using GF-AAS and ETV-ICP, Springer Verlag, Berlin, 2003.

WELZ B.; SPERLING M.; Atomic Absorption Spectrometry, 3rd Ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2007.

MONTASER, A.; Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry. Wiley-WCH, New York, 1998.

Dean J. R.; Practical Inductively Coupled Plasma Spectroscopy, John Wiley & Sons, Chichester, 2005.

Welz, B.; Becker-Ross, H.; Florek, S.; Heitmann, U.; High-Resolution Continuum Source AAS, Wiley-VCH Verlag, Weinheim, 2005.

ALLEN, T.; Powder Sampling and Particle Size Determination, Elsevier, Amsterdam, 2003.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC982 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: APLICAÇÃO EXPERIMENTAL DA ESPECTROMETRIA DE ABSORÇÃO ATÔMICA

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - ASPECTOS GERAIS DA ESPECTROMETRIA Atômica

- 1.1 - Processos de emissão, absorção e fluorescência
- 1.2 - Sistemas de atomização de alta sensibilidade em AAS
- 1.3 - Corretores de fundo
- 1.4 - Determinação elementar por AAS

Após a apresentação da UNIDADE I, os discentes serão divididos em duplas e deverão escolher (com a concordância do docente responsável) um tema de trabalho experimental empregando a espectrometria de absorção atômica, o qual será desenvolvido durante o semestre. Serão feitas discussões semanais (no horário previsto para a disciplina) sobre o andamento do trabalho. No final do semestre, cada dupla deverá apresentar os resultados do trabalho na forma de um seminário e/ou na forma de um artigo científico, o qual será submetido para publicação em periódico indexado.

BIBLIOGRAFIA

WELZ, B.; SPERLING, M.; Atomic Absorption Spectrometry, 3rd Ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2007.

TAYLOR, L. R.; PAPP, R. B.; POLLAND, B. D.; Instrumental Methods for Determining Elements, Wiley, New York, 1994.

EBDON, L.; An Introduction to Analytical Atomic Spectroscopy, 2nd Ed., Wiley, New York, 1998.

Welz, B.; Becker-Ross, H.; Florek, S.; Heitmann, U.; High-Resolution Continuum Source AAS, Wiley-VCH Verlag, Weinheim, 2005.

SKOOG D. A.; HOLLER, F. J.; NIEMAN, T. A.; Princípios de Análise Instrumental, 6a Ed., Bookman, Porto Alegre, 2009.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC983 **Carga Horária** 60 **Créditos:** 4
Nome: APLICAÇÃO EXPERIMENTAL DE ICP OES E ICP-MS

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - TEORIA SOBRE ESPECTROMETRIA DE EMISSÃO ÓPTICA COM PLASMA INDUTIVAMENTE ACOPLADO

- 1.1 - Processos de emissão, absorção, fluorescência da radiação eletromagnética
- 1.2 - Plasmas empregados em análise inorgânica

UNIDADE 2 - TEORIA SOBRE ESPECTROMETRIA DE MASSA PARA ANÁLISE INORGÂNICA

- 2.1 - Princípios de produção e separação de íons inorgânicos em espectrômetros de massa

UNIDADE 3 - INSTRUMENTAÇÃO EM ICP OES E ICP-MS

- 3.1 - Partes principais de um espectrômetro de emissão óptica com plasma indutivamente acoplado: sistemas de introdução de amostra, plasma, espectrômetro de emissão óptica
- 3.2 - Partes principais de um espectrômetro de massa com plasma indutivamente acoplado: sistemas de introdução de amostra, plasma, espectrômetro de massa de baixa e alta resolução. Princípio de funcionamento do instrumento de ICP-MS

UNIDADE 4 - APLICAÇÃO EXPERIMENTAL DA TÉCNICA DE ICP OES E ICP-MS

- 4.1 - Preparo de amostra
- 4.2 - Manutenção e calibração dos instrumentos
- 4.3 - Análise quantitativa e semi-quantitativa (calibração para análise semi-quantitativa, calibração externa, calibração com padrão interno, adição de padrão, diluição isotópica)
- 4.4 - Parâmetros analíticos (sensibilidade, limite de detecção, limite de quantificação, precisão e exatidão)
- 4.5 - Estudo sobre interferências espectrais e não-espectrais
- 4.6 - Acoplamento das técnicas de geração de hidretos (HG), vapor frio (CV), sistemas em fluxo (FI), vaporização eletrotérmica (ETV), *laser ablation* (LA), cromatografia a líquido (LC), cromatografia gás (GC) e eletroforese com as técnicas de ICP OES e ICP-MS

BIBLIOGRAFIA

- ALONSO, J.; GONZALEZ, P.; Isotope Dilution Mass Spectrometry, RSC, Cambridge, 2013.
- BECKER, J. S.; Inorganic Mass Spectrometry: Principles and Applications, 1st Ed., John Wiley & Sons, Chichester, 2007.
- BOUMANS, P. W. J. M.; Inductively Emission Coupled Plasma Spectrometry, John Wiley & Sons, New York, 1987.
- DEAN, J. R.; Practical Inductively Coupled Plasma Spectroscopy, John Wiley & Sons, Chichester, 2005.
- HILL, S. J.; Inductively Coupled Plasma Spectrometry and its Applications, John Wiley & Sons, Oxford, 2008.
- HOFFMANN, E.; STROOBANT, V.; Mass Spectrometry: Principles and Applications, 3rd Ed., John Wiley & Sons, Chichester, 2007.
- HOLLAND, J. G.; BANDURA, D. R.; Plasma Source Mass Spectrometry: Current Trends and Future Developments, RSC, Cambridge, 2005.
- JARVIS, K. E.; GRAY, A. G.; HOUK, R. S.; Handbook of Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry, Viridian Publishing, Dorking, 2003.
- MONTASER, A.; GOLIGGHTLY, D.W. Inductively Coupled Plasmas in Analytical Atomic Spectrometry, WCH Publishers, Inc., New York, 1992.
- MONTASER, A.; Inductively Coupled and Microwave Induced Plasma Sources for Mass Spectrometry, RSC, Cambridge, 1995.
- Montaser, A.; Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry, Wiley-WCH, New York, 1998.
- NÖLTE, J.; ICP Emission Spectrometry. A Practical Guide, Wiley-WCH, Weinheim, Germany. 2003. 267 p.
- NELMS, S.; Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry Handbook. Blackwell, Oxford, 2005.
- PROHASKA, T.; IRRGEHER, J.; ZITEK, A.; JAKUBOWSKI, N.; Sector Field Mass Spectrometry for Elemental and Isotopic Analysis, RSC, Cambridge, 2014.
- THOMAS, R.; Practical Guide to ICP-MS, Marcel Dekker, New York, 2004.



TODOLI, J. L.; MERMET, J. M.; Liquid Sample Introduction in ICP Spectrometry. A Practical Guide, 1st Ed., Elsevier, Amsterdam, 2008.

VANDECASTEELE, C. B.; BLOCK, B.; Modern Methods for Trace Element Determination, John Wiley & Sons, Chichester, 1993.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC984 **Carga Horária** 90 **Créditos:** 6
Nome: ANÁLISE DE RESÍDUOS E CONTAMINANTES

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - TIPOS DE RESÍDUOS E CONTAMINANTES

- 1.1 - Histórico
- 1.2 - Propriedades físico-químicas
- 1.3 - Classificação
- 1.4 - Uso

UNIDADE 2 - METABÓLITOS E PRODUTOS DE DEGRADAÇÃO

1. UNIDADE 3 - RESÍDUOS E CONTAMINANTES

- 3.1 - Definição de resíduos e contaminantes
- 3.2 - Limites máximos de resíduos
- 3.3 - Legislação nacional e internacional
- 3.4 - Programas de monitoramento e ensaios interlaboratoriais
- 3.5 - Guias de validação e determinação de resíduos e contaminantes

UNIDADE 4 - PREPARO DE AMOSTRAS VISANDO ANÁLISE DE RESÍDUOS E CONTAMINANTES

- 4.1 - Métodos clássicos de preparo de amostra
- 4.2 - Extração líquido-líquido
- 4.3 - Extração em fase sólida
- 4.4 - Dispersão da matriz em fase sólida
- 4.5 - QuEChERS
- 4.6 - Técnicas de microextração
- 4.7 - Técnicas alternativas de extração e limpeza

UNIDADE 5 - CROMATOGRAFIA GASOSA NA DETERMINAÇÃO DE RESÍDUOS E CONTAMINANTES

- 5.1 - Sistemas de injeção, colunas, fase móvel, fase estacionária e sistemas de detecção
- 5.2 - Cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas em série (GC-MS/MS): Técnicas de ionização; Analisadores de massas; Efeito matriz; Avanços recentes

UNIDADE 6 - CROMATOGRAFIA LÍQUIDA NA DETERMINAÇÃO DE RESÍDUOS E CONTAMINANTES

- 6.1 - Sistemas de injeção, colunas, fase móvel, fase estacionária e sistemas de detecção
- 6.2 - Cromatografia Líquida acoplada à espectrometria de massas em série (LC-MS/MS): Técnicas de ionização; Analisadores de massas; Efeito matriz; Avanços recentes

BIBLIOGRAFIA

FERNANDEZ-ALBA, A.; Chromatography-Mass Spectrometry Food Analysis for Trace Determination of Pesticide Residues, Elsevier, Amsterdam, 2005.

FIGUEIREDO, E. C.; BORGES, K. B.; QUEIROZ, M. E.; Preparo de Amostras para Análise de Compostos Orgânicos, LTC, Rio de Janeiro, 2015.

JOKANOVIC, M.; The Impact of Pesticides, Academy Publish, Cheyenne, 2012.

SOUNDARARAJAN, R. P.; Pesticides - Recent Trends in Pesticide Residue Assay, Intech, Rijeka, 2012.

TSIPI, D.; BOTITSI, H.; ECONOMOU, A.; Mass Spectrometry for the Analysis of Pesticide Residues and their Metabolites, John Wiley & Sons, New Jersey, 2015.

ZWEIGENBAUM, J.; Mass Spectrometry in Food Safety, Springer, London, 2011.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC985 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: MÉTODOS ELETROQUÍMICOS DE ANÁLISE

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - Histórico e Classificação dos métodos eletroquímicos

UNIDADE 2 - TERMODINÂMICA E CINÉTICA DE REAÇÕES ELETROQUÍMICAS

- 2.1 - Equilíbrio de um sistema eletroquímico
- 2.2 - Equação de Nernst
- 2.3 - Dupla camada elétrica
- 2.4 - Dupla camada elétrica e a transferência de carga
- 2.5 - Corrente capacitiva
- 2.6 - Corrente faradaica

UNIDADE 3 - MÉTODOS ELETROANALÍTICOS

- 3.1 - Voltametria cíclica
- 3.2 - Voltametria de Pulso
- 3.3 - Voltametria de Onda Quadrada
- 3.4 - Voltametria de Redissolução
- 3.5 - Potenciometria
- 3.6 - Condutometria
- 3.7 - Coulometria
- 3.8 - Amperometria

UNIDADE 4 - SENSORES ELETROQUÍMICOS

- 4.1 - Sensores amperométricos
- 4.1 - Sensores potenciométricos
- 4.2 - Biosensores enzimáticos
- 4.3 - Detectores eletroquímicos

UNIDADE 5 - APLICAÇÕES DE MÉTODOS ELETROQUÍMICOS

- 5.1 - Análise inorgânica
- 5.2 - Análise orgânica

BIBLIOGRAFIA

BARD, A. J.; FAULKNER, L. R.; Electrochemical Methods. Fundamentals and Applications, 2nd Ed., John Wiley & Sons, New Jersey, 2001.

WANG, J.; Analytical Electrochemistry, 3rd Ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2006.

SCHOLZ, F.; Electroanalytical Methods: Guide to Experiments and Applications, Springer, London, 2010.

HAMANN, C. H.; HAMNETT, A.; VIELSTICH, W.; Electrochemistry, 2nd Ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2007.

Sawyer <<http://www.wiley.com/WileyCDA/Section/id-302475.html?query=Donald+T.+Sawyer>>, D. T.; Sobkowiak <<http://www.wiley.com/WileyCDA/Section/id-302475.html?query=Andrzej+Sobkowiak>>, A.; Roberts <<http://www.wiley.com/WileyCDA/Section/id-302475.html?query=Julian+L.+Roberts>>, J. L.; Electrochemistry for Chemists, John Wiley & Sons, New Jersey, 1995.

Bard <<http://www.wiley.com/WileyCDA/Section/id-302475.html?query=Allen+J.+Bard>>, A. J.; Stratmann <<http://www.wiley.com/WileyCDA/Section/id-302475.html?query=Martin+Stratmann>>, M.; Unwin <<http://www.wiley.com/WileyCDA/Section/id-302475.html?query=Patrick+R.+Unwin>>, P. R.; Encyclopedia of Electrochemistry, Instrumentation and Electroanalytical Chemistry, Vol. 3, John Wiley & Sons, New Jersey, 2003.

Bard <<http://www.wiley.com/WileyCDA/Section/id-302475.html?query=Allen+J.+Bard>>, A. J.; Stratmann <<http://www.wiley.com/WileyCDA/Section/id-302475.html?query=Martin+Stratmann>>, M.; Rubinstein <<http://www.wiley.com/WileyCDA/Section/id-302475.html?query=Israel+Rubinstein>>, I.; Fujihira <<http://www.wiley.com/WileyCDA/Section/id-302475.html?query=Masamichi+Fujihira>>, M.; Rusling <<http://www.wiley.com/WileyCDA/Section/id-302475.html?query=James+F.+Rusling>>, J. F.; Encyclopedia of Electrochemistry, Modified Electrodes, Vol. 3, John Wiley & Sons, New Jersey, 2007.

banica, F.-G.; Chemical Sensors and Biosensors: Fundamentals and Applications, John Wiley & Sons, New Jersey, 2012.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.





Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC986 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: CROMATOGRAFIA APLICADA

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - DESENVOLVIMENTO HISTÓRICO E IMPORTÂNCIA ATUAL

UNIDADE 2 - PRINCÍPIOS DA CROMATOGRAFIA

2.1 - Conceitos básicos de separação, processos de separação dominados pela adsorção, absorção, troca iônica, exclusão molecular e cromatografia de afinidade

UNIDADE 3 - CROMATOGRAFIA GASOSA

3.1 - Sistemas de injeção, colunas, fase móvel, fase estacionária e sistemas de detecção

3.2 - Cromatografia Gasosa acoplada à Espectrometria de Massas

3.3 - Cromatografia Gasosa Bidimensional Abrangente (GCxGC)

UNIDADE 4 - CROMATOGRAFIA LÍQUIDA

4.1 - Sistemas de injeção, colunas, fase móvel, fase estacionária e sistemas de detecção

4.2 - Cromatografia Líquida acoplada à Espectrometria de Massas

4.3 - Cromatografia Líquida de Ultra Alta Eficiência (UHPLC)

4.4 - Cromatografia Líquida Capilar

4.5 - Cromatografia Líquida com partículas superficialmente porosas (*core shell particles*)

4.6 - Cromatografia Líquida com Interação Hidrofílica (HILIC)

4.7 - Cromatografia em Fluxo Turbulento

4.8 - Cromatografia Líquida Bidimensional Abrangente (LCxLC)

4.9 - Cromatografia com Fluido Supercrítico

UNIDADE 5 - ANÁLISE QUANTITATIVA E QUALITATIVA

UNIDADE 6 - APLICAÇÕES E AVANÇOS RECENTES NA ÁREA

BIBLIOGRAFIA

AQUINO NETO, F. R.; NUNES, D. S. S.; Cromatografia - Princípios Básicos e Técnicas Afins, Interciência, Rio de Janeiro, 2003.

COLLINS, C. H.; BRAGA, G. L.; BONATO, P. S.; Fundamentos de Cromatografia, Editora da UNICAMP, Campinas, 2006.

FOWLIS, I. A.; Gas Chromatography: Analytical Chemistry by Open Learning, John Wiley & Sons, West Sussex, 1998.

LANÇAS, F. M.; Cromatografia em Fase Gasosa, Acta, São Carlos, 1993.

LANÇAS, F. M.; Cromatografia Líquida Moderna, Editora Átomo, Campinas, 2009.

LANÇAS, F. M.; Validação de Métodos Cromatográficos de Análise, RiMa, São Carlos, 2004.

GROB, R. L.; BARRY E. F.; Modern Practice of Gas Chromatography, 4th Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2004.

MCNAIR, H. M.; MILLER, J. M.; Basic Gas Chromatography, John Wiley & Sons, New York, 2009.

SKOOG, D. A.; HOLLER, F. J.; NIEMAN, T. A.; Princípios de Análise Instrumental, 5ª Ed., Bookman, Porto Alegre, 2002.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC987 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: ELETROFORESE CAPILAR

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - Histórico

UNIDADE 2 - FUNDAMENTOS TEÓRICOS

- 2.1 - Princípio do movimento eletroforético
- 2.2 - Eletrosmose
- 2.3 - Definição de eficiência
- 2.4 - Seletividade e resolução na separação

UNIDADE 3 - INSTRUMENTAÇÃO

- 3.1 - Equipamentos
- 3.2 - Capilares
- 3.4 - Injeção da amostra
- 3.5 - Detectores
- 3.6 - Fontes de alta tensão

UNIDADE 4 - MÉTODOS DE SEPARAÇÃO EM ELETROFORESE CAPILAR

- 4.1 - Eletroforese capilar de zona
- 4.2 - Eletroforese capilar em gel
- 4.4 - Eletrocromatografia micelar
- 4.5 - Focalização isoeletrica capilar
- 4.6 - Isotacoforese capilar
- 4.7 - Eletrocromatografia capilar

UNIDADE 5 - FATORES QUE INFLUENCIAM NA PERFORMANCE DA CE

- 5.1 - Fatores dispersivos
- 5.2 - Parâmetros experimentais
- 5.4 - Eletrólito de trabalho

UNIDADE 6 - CAPILARES E O FLUXO ELETROOSMÓTICO

- 6.1 - Efeitos da solução no EOF
- 6.2 - Modificação do capilar

UNIDADE 7 - DETECTORES EM CE

- 7.1 - UV/Vis (direta e indireta)
- 7.2 - Fluorescência
- 7.3 - Eletroquímicos
- 7.4 - Espectrometria de massa

UNIDADE 8 - APLICAÇÕES EM CE

- 8.1 - Análise orgânica
- 8.2 - Análise inorgânica
- 8.3 - Diagnósticos clínicos

BIBLIOGRAFIA

- KUHN, R.; HOFFSTETTER-KUHN, S.; Capillary Electrophoresis: Principles and Practice, Springer Laboratory, Berlin, 1993.
- JANDIK, P.; BONN, G.; Capillary Electrophoresis of Small Molecules and Ions, Wiley-VCH, Weinheim, 1993.
- KOK, W.; Chromatographia - Capillary Electrophoresis: Instrumentation and Operation, Vol. 51, Vieweg+Teubner Verlag, Braunschweig, 2000.
- HARRIS, D.; Análise Química Quantitativa, 8a Ed., LTC, Rio de Janeiro, 2012.



TAVARES; M.; Química Nova, 19(2), 173-181, 1996.

TAVARES; M.; Química Nova, 20(5), 493-511, 1997.

Schmitt-Kopplin, P.; Capillary Electrophoresis - Methods and Protocols, Humana Press, New York, 2008.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC988 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: TÓPICOS ESPECIAIS EM QUÍMICA ORGÂNICA I

Objetivos

Conteúdo Programático

BIBLIOGRAFIA

Artigos científicos recentes sobre o tema, publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC989 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: TÓPICOS ESPECIAIS EM QUÍMICA ORGÂNICA II

Objetivos

Conteúdo Programático

BIBLIOGRAFIA

Artigos científicos recentes sobre o tema, publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC990 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: TÓPICOS ESPECIAIS EM QUÍMICA ORGÂNICA III

Objetivos

Conteúdo Programático

BIBLIOGRAFIA

Artigos científicos recentes sobre o tema, publicados em periódicos da área.

**Dados da Disciplina**

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC991 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: TÓPICOS ESPECIAIS EM QUÍMICA ORGÂNICA IV

Objetivos**Conteúdo Programático****BIBLIOGRAFIA**

Artigos científicos recentes sobre o tema, publicados em periódicos da área.



Programa de Disciplina de Graduação

Dados da Disciplina

Departament DEPTO. DE QUÍMICA - QMC

Código: QMC992

Carga Horária

45

Créditos 3

Nome: QUÍMICA ORGÂNICA AVANÇADA I

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - TEORIA DO ESTADO DE TRANSIÇÃO

- 1.1 - Postulado de Hammond
- 1.2 - Controle Cinético e Termodinâmico de uma Reação
- 1.3 - Princípio de Curtin-Hammett
- 1.4 - Estrutura e Estabilidade de Carbocátions, Carbânions e Carbenos e Radicais

UNIDADE 2 - ÁCIDOS, BASES, ELETÓFILOS E NUCLEÓFILOS

- 2.1 - Ácidos & Bases duros e moles
- 2.2 - Solventes apolares, solventes polares próticos e apróticos

UNIDADE 3 - EFEITOS ELETRÔNICOS E ESTÉRICO DO SUBSTITUINTE

- 3.1 - Correlações de Estrutura e Reatividade

UNIDADE 4 - REAÇÕES DE SUBSTITUIÇÃO NUCLEOFÍLICA ALIFÁTICA

- 4.1 - Reações SN2, SN1, SN1'
- 4.2 - Cinética de Reação
- 4.3 - Efeito da estrutura do Substrato, do Nucleófilo, do Grupo Abandonador, e Efeito do Solvente
- 4.4 - Estereoquímica das reações

UNIDADE 5 - REAÇÕES DE ELIMINAÇÃO

- 5.1 - Reações E2, E1, E1bc. Cinética de Reação
- 5.2 - Efeito da estrutura do Substrato, da Base, do Grupo Abandonador, e Efeito do Solvente
- 5.3 - Estereoquímica das reações: Eliminações syn e anti

UNIDADE 6 - REAÇÕES DE ADIÇÃO EM DUPLAS LIGAÇÕES CARBONO-CARBONO

- 6.1 - Reações AdE2, AdE3, Outras
- 6.2 - Cinética de Reação. Efeito da estrutura do Substrato, do Eletrófilo e Efeito do Solvente
- 6.3 - Estereoquímica das reações, Adições syn e anti

UNIDADE 7 - REAÇÕES DE ADIÇÃO NA CARBONILA

- 7.1 - Intermediário tetraédrico
- 7.2 - Reações de adição, substituição e adição/eliminação

UNIDADE 8 - REAÇÕES DE SUBSTITUIÇÃO ELETROFÍLICA AROMÁTICA

- 8.1 - Complexo- π e Complexo-sigma
- 8.2 - Efeito do substituinte
- 8.3 - Principais reações

UNIDADE 9 - REAÇÕES DE ELIMINAÇÃO

- 9.1 - Mecanismo de adição-eliminação: Complexo de Meisenheimer
- 9.2 - Mecanismo de Eliminação-Adição: Benzino

UNIDADE 10 - ALQUILAÇÃO DE CARBONOS NUCLEOFÍLICOS

- 10.1 - Regiosseletividade e Estereosseletividade na Formação de Enolatos
- 10.2 - Enolato termodinâmico e Enolato Cinético
- 10.3 - Alquilação de Enolatos

UNIDADE 11 - REAÇÕES DE NUCLEÓFILOS DE CARBONO COM O GRUPO CARBONILA

- 11.1 - Condensação Aldólica e Condensação de Claisen
- 11.2 - Outras Condensações
- 11.3 - Adição Conjugada



Programa de Disciplina de Graduação

UNIDADE 12 - REAÇÕES DE REDUÇÃO

- 12.1 - Redução de ligações duplas carbono-carbono
- 12.2 - Redução de compostos carbonílicos

UNIDADE 13 - REAÇÕES DE OXIDAÇÃO

- 13.1 - Oxidação de ligações duplas carbono-carbono
- 13.2 - Oxidação de álcoois

BIBLIOGRAFIA BÁSICA E COMPLEMENTAR

CAREY, F. A.; SUNDBERG, R. J.; Advanced Organic Chemistry. Part A: Structure and Mechanism; Part B: Reactions and Synthesis, 5th Ed., Springer, New York, 2007.

MARCH, J.; Advanced Organic Chemistry. Reactions, Mechanisms and Structure, 5th Ed., Wiley Interscience, New York, 2001.

FLEMING, I.; Frontiers Orbitals and Organic Chemical Reactions, John Wiley & Sons, New York, 2010.

CARPENTER, B. K.; Determination of Organic Reaction Mechanisms, John Wiley & Sons, New York, 1984.

SYKES, P.; A Guidebook to Mechanism in Organic Chemistry, 6th Ed., Longman Scientific Technical, Cambridge, 1985.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos.



Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC993 **Carga Horária** 60 **Créditos:** 4
Nome: QUÍMICA ORGÂNICA AVANÇADA II

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1- Conceitos básicos de Síntese e Retrossíntese - INTERCONVERSÃO DE GRUPOS FUNCIONAIS (FGI)

UNIDADE 2 - Redução

UNIDADE 3 - Oxidação

UNIDADE 4 - Grupos Protetores: FORMAÇÃO DE LIGAÇÃO SIMPLES CARBONO-CARBONO

UNIDADE 5 - Compostos Organometálicos em síntese orgânica

5.1 - Síntese e reatividade (Li, Mg, Cu, Zn, Cd, etc.) - Compostos de Estanho (Sonogashira, Heck, Suzuki, Stille e Hartwig-Buchwald)

UNIDADE 6 - Enolatos: preparação e reatividade

UNIDADE 7 - Wittig e Correlatas

UNIDADE 8 - Reações pericíclicas: Diels-Alder, rearranjo sigmatrópico e reações eletrocíclicas

UNIDADE 9 - Compostos de Silício

UNIDADE 10 - Compostos de Enxofre

UNIDADE 11 - Compostos de Selênio

UNIDADE 12 - Compostos de Boro

UNIDADE 13 - Retrossíntese

UNIDADE 1- Conceitos básicos de Síntese e Retrossíntese - INTERCONVERSÃO DE GRUPOS FUNCIONAIS (FGI)

UNIDADE 2 - Redução

UNIDADE 3 - Oxidação

UNIDADE 4 - Grupos Protetores: FORMAÇÃO DE LIGAÇÃO SIMPLES CARBONO-CARBONO

UNIDADE 5 - Compostos Organometálicos em síntese orgânica

5.1 - Síntese e reatividade (Li, Mg, Cu, Zn, Cd, etc.) - Compostos de Estanho (Sonogashira, Heck, Suzuki, Stille e Hartwig-Buchwald)

UNIDADE 6 - Enolatos: preparação e reatividade

UNIDADE 7 - Wittig e Correlatas

UNIDADE 8 - Reações pericíclicas: Diels-Alder, rearranjo sigmatrópico e reações eletrocíclicas

UNIDADE 9 - Compostos de Silício

UNIDADE 10 - Compostos de Enxofre

UNIDADE 11 - Compostos de Selênio

UNIDADE 12 - Compostos de Boro

UNIDADE 13 - Retrossíntese

BIBLIOGRAFIA

SMITH M.; Organic Synthesis, 3rd Ed, Elsevier, Amsterdam, 2010.



FURHOP, J.-H.; LI, G.; Organic Synthesis: Concepts and Methods, Wiley VCH, Weinheim, 2003.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC995 **Carga Horária** 90 **Créditos:** 6
Nome: MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS EM QUÍMICA ORGÂNICA

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - ESPECTROMETRIA DE MASSAS

1.1 - Teoria básica, instrumentação, procedimento experimental, interpretação de espectros, fragmentações típicas de classes representativas de moléculas da química orgânica e exercícios.

UNIDADE 2 - ESPECTROMETRIA NO INFRAVERMELHO

2.1 - Teoria básica, instrumentação, procedimento experimental, interpretação dos espectros, frequências características de grupamentos, exemplos e exercícios

UNIDADE 3 - ESPECTROSCOPIA DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR PROTÔNICA

3.1 - Histórico, teoria básica, instrumentação, manuseio da amostra, o espectro de RMN, deslocamento químico, fatores que afetam o deslocamento químico, acoplamento spin-spin, dupla ressonância (desacoplamento), deslocamento químico de hidrogênios ligados a carbono, deslocamento químico de hidrogênios ligados a heteroátomos, reagentes de deslocamento lantanídico, sistemas de spins, equivalência química e magnética, exemplos, exercícios.

UNIDADE 4 - ESPECTROSCOPIA DE RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE CARBONO-13

4.1 - Diferenças fundamentais entre RMN de prótons e carbono-13: Vantagens e desvantagens, técnicas de pulso e transformadas de Fourier, deslocamento químico, fatores que afetam o deslocamento químico, acoplamento spin-spin, técnicas de dupla ressonância (desacoplamento), efeito nuclear de Overhauser, cálculo empírico de deslocamento químico, aplicações de RMN de carbono-13, exemplos, exercícios.

UNIDADE 5 - NOÇÕES GERAIS DE TÉCNICAS DE PULSO E TRANSFORMADAS DE FOURIER EM RMN DE 2-D

5.1 - Spin echo, APT, INEPT, DEPT, Espectroscopia correlacionada (COSY, TOCSY, RELAY, HMQC/HSQC, HMBC, INADEQUATE) espectroscopia bidimensional das constantes de acoplamento (J-Resolvido), Espectroscopia do efeito nuclear Overhauser (NOESY, ROESY, HOESY)

BIBLIOGRAFIA

SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMBLE D. J.; Spectrometric Identification of Organic Compounds, 7th Ed., Wiley, New York, 2005.

PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S.; VYVYAN, J. R.; Introdução a Espectroscopia, Tradução da 4ª Edição Americana, Cenage Learning, São Paulo, 2010.

CREWS, P.; RODRIGUES, J.; JASPARS. M.; Organic Structure Analysis, Oxford University Press, New York, 1998.

BECKER, E. D.; High Resolution NMR Theory and Chemical Applications, 2nd Ed., Academic Press, New York, 1980.

JACKMAN, L. M.; STERNHELL, S.; Applications of Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy in Organic Chemistry, 2nd Ed., Pergamon Press, New York, 1969.

BREITMAIER, E.; VOELTER, W.; Carbon-13 NMR Spectroscopy, 3rd Ed., Verlag, New York, 1987.

RHAMAN, A.; Nuclear Magnetic Resonance, Springer Verlag, New York, 1986.

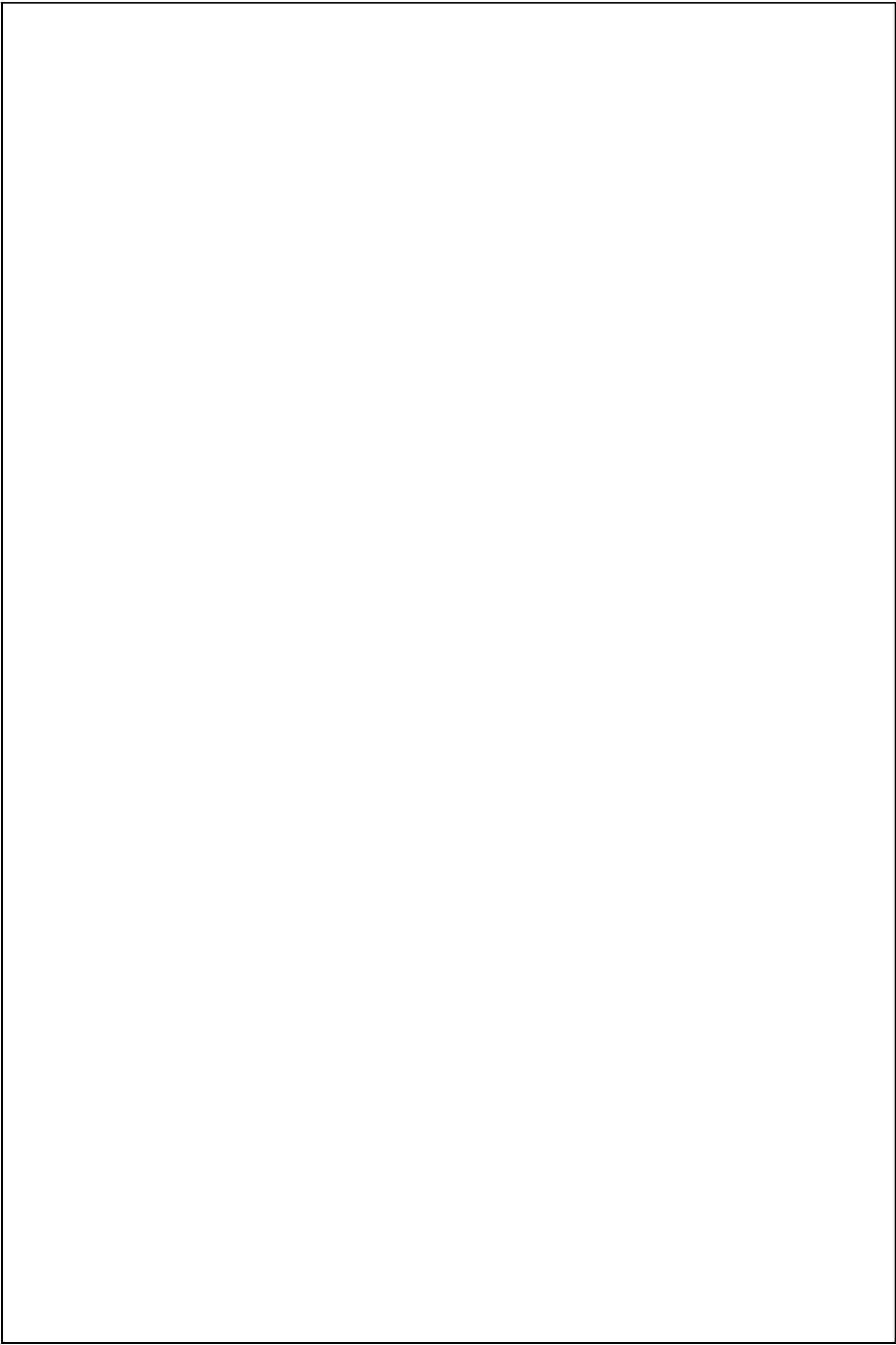
NAKANISHI, K.; SOLOMON, P. H.; Infrared Absorption Spectroscopy, 2nd Ed., Holden Day, San Francisco, 1977.

MCLAFFERTY, F. W.; TURECEK, F.; Interpretation of Mass Spectra, 4th Ed., University Science Books, Sausalito, 1993.

SANDERS, J. K. M.; HUNTER, B. K.; Modern NMR Spectroscopy: A Guide for Chemists, 2nd Ed., Oxford University Press, Oxford, 1994.

FRIEBOLIN, H.; Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy, 4th Ed., John Wiley & Sons, Weinheim, 2005.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.





Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC996 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: APLICAÇÃO EXPERIMENTAL DE ESPECTROSCOPIA DE RMN

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - OPERAÇÃO DO APARELHO DE RMN

1.1 - Registro de espectro 1D de ¹H, ¹³C e heteronúcleos, integração, expansão de espectros, uso do Lock e desacoplamento

UNIDADE 2 - TÉCNICAS DE PULSO TRANSFORMADA DE FOURIER

2.1 - Coordenadas cartesianas, significados dos pulsos de radiofrequência, precessão da magnetização transversal, relação entre a orientação do vetor, tempo de sinal e frequência do sinal

UNIDADE 3 - EXPERIMENTOS RMN DE 1D

3.1 - Paralelo entre RMN de prótons e Carbono-13, o deslocamento químico, acoplamento spin-spin (C-H e N-H), técnicas de desacoplamento, integração de espectros de RMN, mecanismos de relaxação de spin, medidas do tempo de relação longitudinal, medidas do efeito nuclear de Overhauser

UNIDADE 4 - RESSONÂNCIA MAGNÉTICA NUCLEAR DE 2D

4.1 - Mecânica do experimento de 2D, espectroscopia correlacionada homonuclear(COSY H-H), espectroscopia correlacionada heteronuclear (COSY C-H), espectroscopia da constante de acoplamento homo-e heteronuclear, espectroscopia bidimensional do efeito nuclear de Overhauser (NOESY), INADEQUATE, aplicações de técnicas de 2D na atribuição de sinais de classe de moléculas representativas da química orgânica e biorgânica

UNIDADE 5 - RMN NO ESTADO SÓLIDO

5.1 - Bases Físicas da RMN no estado sólido: comparação com RMN em solução

5.2 - Operação básica do equipamento de RMN no estado sólido

5.3 - Experimentos 1D de ¹³C, ¹⁵N, ⁷⁷Se, ³¹P

UNIDADE 6 - PROCESSOS DINÂMICOS NA RMN

6.1 - Experimentos com temperatura variável

6.2 - Experimentos de titulação

BIBLIOGRAFIA

MARTIN, M. L.; DELPUECH, J. J.; MARTIN, G. J.; Practical NMR Spectroscopy, Heyden & Son Ltd., London, 1980.

RHAMAN, A.; Nuclear Magnetic Resonance, Springer Verlag, New York, 1986.

MCLAFFERTY, F. W.; TURECEK, F.; Interpretation of Mass Spectra, 4th Ed., University Science Books, Sausalito, 1993.

FRIEBOLIN, H.; Basic One- and Two-Dimensional NMR Spectroscopy, 4th Completely Revised Edition, John Wiley & Sons, Weinheim, 2005.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC997 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: ESTEREOQUÍMICA

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - ESTRUTURA E SIMETRIA MOLECULAR

1.1 - Quiralidade

UNIDADE 2 - CONCEITOS DE CONFIGURAÇÃO E CONFORMAÇÃO

2.1 - Tipos de estereoisomeria: enantiomerismo e diastereomerismo

UNIDADE 3 - CONFIGURAÇÃO ABSOLUTA

3.1 - Nomenclatura R e S

3.2 - Correlações configuracionais por métodos químicos

UNIDADE 4 - SEPARAÇÃO DE ENANTIÔMEROS E DIASTEREÔMEROS

4.1 - Resolução cinética e síntese assimétrica

4.2 - Pró-quiralidade

UNIDADE 5 - ANÁLISE CONFORMACIONAL

5.1 - Determinação de conformações moleculares por métodos físicos

5.2 - Conformações em compostos acíclicos

UNIDADE 6 - CONFORMAÇÕES EM COMPOSTOS CÍCLICOS

6.1 - Cicloexano e derivados

6.2 - Outros sistemas cíclicos

UNIDADE 7 - ESTEREOQUÍMICA DINÂMICA

7.1 - Estereosseletividade e estereoespecificidade

7.2 - Fatores estéricos e estereoeletrônicos

BIBLIOGRAFIA

ELIEL, E. L.; Stereochemistry of Organic Compounds, John Wiley & Sons, New York, 1994.

NOGRADI, M.; Stereoselective Synthesis: A Practical Approach, John Wiley & Sons, New York, 1995.

AITKEN, R. A.; KILENYI, S. N.; Asymmetric Synthesis, Chapman & Hall, Glasgow 1992.

BEROVA, N.; POLAVARAPU, P.; NAKANISHI, K.; WOODY, R. W.; Comprehensive Chiroptical Spectroscopy, Vol. 1 e 2, John Wiley & Sons, New York, 2012.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC998 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: QUÍMICA DE PRODUTOS NATURAIS

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - Desenvolvimento da Química de Produtos Naturais

UNIDADE 2 - PRINCIPAIS FONTES E MÉTODOS DE ISOLAMENTOS

UNIDADE 3 - MÉTODOS DE DETERMINAÇÃO ESTRUTURAL

3.1 - Usos de técnicas de Ultra-violeta, Infravermelho, Espectroscopia de Massa, DC Ressonância Magnética Nuclear de Prótons e Carbono-13 e técnicas hífenadas GC-MS, LC-MS, LC-MS-RMN

UNIDADE 4 - COMPOSTOS ISOPRENÓIDES

4.1 - Classificação, determinação estrutural, biossíntese e síntese

4.2 - Óleos Essenciais: obtenção e identificação; Determinação do IK e Análise GC-MS (experimental)

UNIDADE 5 - COMPOSTOS AROMÁTICOS

5.1. Flavonoides: classificação, obtenção, determinação estrutural, biossíntese e atividade biológica

5.2. Lignanas: obtenção, determinação estrutural, biossíntese e atividade biológica

5.3. Cumarinas: obtenção, determinação estrutural, biossíntese e atividade biológica

UNIDADE 6 - ALCALÓIDES

6.1 - Classificação, obtenção, isolamento, determinação estrutural, síntese e biossíntese

UNIDADE 7 - PEPTÍDEOS

7.1 - Obtenção, isolamento, síntese e biossíntese

UNIDADE 8 - AVANÇOS NA QUÍMICA DE PRODUTOS NATURAIS

8.1- Biotecnologia

8.2 - Metabolômica

8.3 - Uso da desreplicação em produtos naturais

UNIDADE 9 - SEMINÁRIOS EM TEMAS ATUAIS MINISTRADOS PELOS ALUNOS

BIBLIOGRAFIA

IKAN, R.; Natural Products - A Laboratory Guide, 2nd Ed., Academic Press, Inc., San Diego, 1991.

NAKANISHI, K.; GOTO, T.; ITÔ, S.; NATORI, S.; NOZOE, S.; Natural Products Chemistry, Vol. 3, Kodansha LTDA, Tokyo, 1983.

ADAMS, R. P.; Identification of Essential Oil Components by Gas Chromatography Mass Spectroscopy/Quadrupole Mass Spectroscopy, Allured Publishing Corporation, Illinois, 2001.

BHAT, S. V.; NAGASAMPAGI, B. A.; SIVAKUMAR, M.; Chemistry of Natural Products, 1st Ed., Springer, Berlin, 2005.

SARKER, S. D.; LATIF, Z.; GRAY, A. I.; Natural Products Isolation, 2nd Ed., Human Press, New Jersey, 2006.

BHAT, S. V.; NAGASAMPAGI, B. A.; SIVAKUMAR, M.; Chemistry of Natural Products, 1st Ed., Springer, Berlin, 2005.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área, como Natural Product Reports, Journal of Natural Products, Phytochemistry Reviews, entre outros.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC999 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: QUÍMICA DE HETEROCICLICOS

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - CONCEITOS BÁSICOS E NOMENCLATURA

1.1 - Nomenclaturas: IUPAC (Trivial e Hantzsch-Widman-Patterson) e Substitutiva (Stelzner e Chemical Abstract) para compostos mono-heterocíclicos e sistemas poli-heterocíclicos

UNIDADE 2 - ESTRUTURA DE COMPOSTOS HETEROCÍCLICOS

2.1 - Relação entre heterociclos e compostos carbociclicos

UNIDADE 3 - ESTRUTURA DE ANÉIS DE 3 a 7 MEMBROS

3.1 - Compostos monociclicos, benzoderivados, aspectos termodinâmicos e tautomerismo

UNIDADE 4 - REATIVIDADE DE HETEROCICLOS

4.1 - Aspectos gerais e Tipos de reações

4.2 - Reatividade dos principais anéis mono-heterocíclicos de cinco membros, reações anelares e influência de substituintes

4.3 - Reatividade dos principais anéis mono-heterocíclicos de seis membros, reações anelares e influência de substituintes

UNIDADE 5 - SÍNTESE DE COMPOSTOS HETEROCÍCLICOS

5.1 - Reações de ciclização intermoleculares: reações de ciclocondensação clássicas tipo [n+n], ciclização 1,3-dipolar e reações multi-componentes

5.2 - Reações de ciclização intramoleculares.

5.3 - Reações de rearranjo em anéis pré-existentes (processos tipo *ANRORC*)

BIBLIOGRAFIA

KATRITZKY, A. R.; RAMSDEN, C. A.; SCRIVEN, E. F. V.; TAYLOR, R. J. K.; Comprehensive Heterocyclic Chemistry III, Vols. 1-14, 1st Ed., Elsevier, Amsterdam, 2008.

EICHER, T.; HAUPTMANN, S.; The Chemistry of Heterocycles: Structure, Reactions, Syntheses, and Applications, 2nd Ed., Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim, 2003.

DAVIES, D. T.; Aromatic Heterocyclic Chemistry, 8rd Ed., Oxford University Press, Oxford, 2001.

Artigos científicos recentes publicados em periódicos internacionais da área e que abordem a química de compostos heterocíclicos.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1800 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: TÓPICOS ESPECIAIS EM QUÍMICA INORGÂNICA I

Objetivos

Conteúdo Programático

BIBLIOGRAFIA

Artigos científicos recentes sobre o tema, publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1801 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: TÓPICOS ESPECIAIS EM QUÍMICA INORGÂNICA II

Objetivos

Conteúdo Programático

BIBLIOGRAFIA

Artigos científicos recentes sobre o tema, publicados em periódicos da área.

**Dados da Disciplina**

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1802 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: TÓPICOS ESPECIAIS EM QUÍMICA INORGÂNICA III

Objetivos**Conteúdo Programático****BIBLIOGRAFIA**

Artigos científicos recentes sobre o tema, publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1803 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: TÓPICOS ESPECIAIS EM QUÍMICA INORGÂNICA IV

Objetivos

Conteúdo Programático

BIBLIOGRAFIA

Artigos científicos recentes sobre o tema, publicados em periódicos da área.



Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1804 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: QUÍMICA INORGÂNICA AVANÇADA

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - ASPECTOS GERAIS DAS LIGAÇÕES QUÍMICAS

1.1 - Teoria de Lewis: Regra de Langmuir; Carga formal e estabilidade; Estereoquímica - Método VSEPR
1.2 - Teoria de ligação de valência: Hibridização e geometria; Regra de Bent; Expansão do octeto e uso dos orbitais d; Ligações múltiplas
1.3 - Teoria dos orbitais moleculares: Moléculas diatômicas homonucleares; Moléculas diatômicas heteronucleares; Moléculas poliatômicas; Orbitais de fronteira; Formação de bandas

UNIDADE 2 - LIGAÇÕES EM COMPOSTOS DE COORDENAÇÃO

2.1 - Estruturas eletrônicas: Dados termodinâmicos; Susceptibilidade magnética
2.2 - Teoria do campo ligante: Orbitais moleculares para complexos octaédricos, tetraédricos e quadráticos; Energia de estabilização do campo ligante; Interações doador-sigma, receptor-pi e doador-pi; Séries espectroquímica, nefelauxética e magnetoquímica
2.3 - Efeito Jahn-Teller

UNIDADE 3 - TERMODINÂMICA DA FORMAÇÃO DE COMPLEXOS

3.1 - Constantes de formação: Tendências nas constantes de formação sucessivas
3.2 - Efeito quelato e efeitos macrocíclicos
3.3 - Efeitos estéricos e eletrônicos

UNIDADE 4 - PROPRIEDADES MAGNÉTICAS

4.1 - Magnetismo clássico
4.2 - Contribuição orbital para o momento magnético: Contribuição do spin para o momento magnético; Acoplamento spin-órbita
4.3 - Compostos magneticamente não-diluídos
4.4 - Magnetos moleculares

UNIDADE 5 - Introdução à química organometálica

5.1 - Desenvolvimento histórico e tendências atuais
5.2 - Classificação dos compostos organometálicos
5.3 Nomenclatura atual
5.4 Denticidade x hapticidade
5.5 Regra dos 18 elétrons e estabilidade

BIBLIOGRAFIA

MESSLER, G. L.; FISCHER, P. J.; TARR, D. A.; Química Inorgânica, 5a Ed., Pearson, São Paulo, 2014.

SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W.; Química Inorgânica, 4ª Ed., Bookman, Porto Alegre, 2008.

TOMA, H. E.; Coleção de Química Conceitual: Química de Coordenação, Organometálica e Catálise, Vol. 4, Blucher, São Paulo, 2013.

HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G.; Química Inorgânica, 4ª Ed., Vol. 1 e 2, LTC, Rio de Janeiro, 2013.

HUHEEY, J. E.; KEITER, E. A.; KEITER, R. L.; Inorganic Chemistry - Principles of Structure and Reactivity, 4th Ed., Harper Collins College Publishers, New York, 1993.

DOUGLAS, B.; McDANIEL, D.; ALEXANDER, J.; Concepts and Models of Inorganic Chemistry, 3rd Ed., Wiley, New York, 1994.

KETTLE, S. F. A.; Physical Inorganic Chemistry: A Coordination Chemistry Approach, Oxford University Press, Oxford, 2000.

ATKINS, P. W.; OVERTON, T.; ROURKE, J.; WELLER, M.; ARMSTRONG, F.; HAGERMAN, M.; Shriver & Atkins' Inorganic Chemistry, 5th Ed., OUP Oxford, Oxford, 2009.

LAWRANCE, G. A.; Introduction to Coordination Chemistry, Wiley, Chichester, 2010.

COTTON, F. A.; WILKINSON, G.; MURILLO, C. A.; BOCHMANN, M.; Advanced Inorganic Chemistry, 6th Ed., Wiley-Interscience, New York, 1999.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.





Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1805 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: MÉTODOS INSTRUMENTAIS EM QUÍMICA INORGÂNICA

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

Unidade 1 - Ressonância magnética nuclear

- 1.1 - Princípios
- 1.2 - Deslocamento químico
- 1.3 - Equivalência magnética e química
- 1.4 - Acoplamento e desacoplamento
- 1.5 - Núcleos quadrupolares
- 1.6 - Processos dinâmicos em RMN
- 1.7 - Processos de relaxamento
- 1.8 - Espectros bidimensionais
- 1.9 - RMN de alta resolução no estado sólido

UNIDADE 2 - Ressonância Paramagnética Eletrônica

- 2.1 - Princípios de ressonância de elétron paramagnético
- 2.2 - Teoria básica de RPE
- 2.3 - Interpretação dos espectros

UNIDADE 3 - ESPECTROSCOPIAS

- 3.1 - Espectroscopia de Mössbauer
- 3.2 - Espectroscopia eletrônica: XPS e UPS
- 3.3 - Espectroscopia XANES e EXAFS

UNIDADE 4 - ELETROQUÍMICA

- 4.1 - Fundamentos de eletroquímica
- 4.2 - Instrumentação e eletrodos
- 4.3 - Voltametria, coulometria e amperometria
- 4.4 - Espectroeletroquímica UV-Vis
- 4.5 - Técnicas avançadas em eletroquímica

UNIDADE 5 - Outras técnicas

- 5.1 - Espectrometria de massa
- 5.2 - Análise termogravimétrica
- 5.3 - Calorimetria
- 5.4 - Magnetoquímica
- 5.5 - Fluorescência de raios-X e EDS
- 5.6 - Medição de área superficial e porosidade

BIBLIOGRAFIA

- BAGOTSKY, V. S.; Fundamentals of Electrochemistry, 2nd Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2005.
- BARD, A. J.; FAULKNER, L. R.; Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications, 2nd Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2000.
- BRISDON, A. K.; Inorganic Spectroscopic Methods, Oxford University Press, Oxford, 1998.
- SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W.; Química Inorgânica, 4ª Ed., Bookman, Porto Alegre, 2008.
- GUNTHER, H.; NMR Spectroscopy: Basic Principles, Concepts and Applications in Chemistry, 3rd Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2013.
- KETTLE, S. F. A.; Physical Inorganic Chemistry: A Coordination Chemistry Approach, Oxford University Press, Oxford, 2000.
- IGGO, J. A.; NMR Spectroscopy in Inorganic Chemistry, Oxford University Press, Oxford, 1999.
- MESSLER, G. L.; FISCHER, P. J.; TARR, D. A.; Química Inorgânica, 5ª Ed., Pearson, São Paulo, 2014.
- SANDERS J. K. M.; HUNTER, B. K.; Modern NMR Spectroscopy, 2nd Ed., Oxford University Press, Oxford, 1997.



Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1806 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: FUNDAMENTOS DE ESPECTROSCOPIA

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - ELEMENTOS DE SIMETRIA E OPERAÇÕES DE SIMETRIA

- 1.1 - Simetria de moléculas livres e de redes cristalinas moleculares
- 1.2 - Correlação da simbologia de Schoenflies e Hermann-Mauguin
- 1.3 - Multiplicação de operações e elementos de simetria
- 1.4 - Grupos pontuais; Grupos pontuais cristalográficos e grupos espaciais
- 1.5 - Propriedades de grupos e definições na teoria de grupos
- 1.6 - Decréscimo de simetria e subgrupos

UNIDADE 2 - VETORES E MATRIZES: TABELAS DE CARACTERES

- 2.1 - Representação vetorial dos graus de liberdade
- 2.2 - Representação de operações de simetria em forma de matrizes
- 2.3 - Montagem da Tabela de Caracteres e relações fundamentais
- 2.4 - Grupos pontuais degenerados; multiplicação de caracteres
- 2.5 - Teoria da representação; a matriz rotacional

UNIDADE 3 - ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO E ESPECTROSCOPIA RAMAN

- 3.1 - Atividade de vibrações; os modos normais de vibração
- 3.2 - Vibrações IV ativas e momento dipolar
- 3.3 - O Efeito Raman
- 3.4 - O tensor de polarizabilidade
- 3.5 - Espécies de simetria de vibrações Raman-ativas

UNIDADE 4 - ANÁLISE VIBRACIONAL

- 4.1 - Cálculo da representação reduzível da soma de todos os graus de liberdade
- 4.2 - Coordenadas de deslocamento cartesiano
- 4.3 - A matriz rotacional e representações redutíveis
- 4.4 - Representação redutível dos graus de liberdade vibracionais; fórmulas de redução
- 4.5 - Cálculo da representação irreduzível dos graus de liberdade vibracionais
- 4.6 - Coordenadas internas como bases para matrizes vibracionais
- 4.7 - Espectro vibracional de moléculas
- 4.8 - Cálculo dos Estiramentos
- 4.9 - O método da Simetria Local
- 4.10 - Interpretação de espectros de infravermelho e Raman

UNIDADE 5 - Espectroscopia fotoeletrônica

- 5.1 - Transições eletrônicas
- 5.2 - A serie espectroquímica
- 5.3 - Regras de seleção
- 5.4 - Termos espectroquímicos
- 5.5 - Parâmetros de Racah
- 5.6 - Diagramas de Orgel e de Tanabe-Sugano
- 5.7 - Espectroscopia eletrônica por refletância difusa
- 5.8 - Interpretação de espectros UV/Vis
- 5.9 - Transferência de carga
- 5.10 - Fluorescência e fosforescência

BIBLIOGRAFIA

BERSUCKER, I. B.; Electronic Structure and Properties of Transition Metal Compounds: Introduction to the Theory, 2nd Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2010.

COLTHUP, N. B.; DALY, L. H.; WIBERLEY, S. E.; Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy, 3rd Ed., Academic Press, New York, 1990.

KETTLE, S. F. A.; Symmetry and Structure Readable Group Theory for Chemists, 3rd Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2007.

LARKIN, P.; Infrared and Raman Spectroscopy; Principles and Spectral Interpretation, Elsevier, Amsterdam, 2011.



OLIVEIRA, G. N. M.; Simetria de Moléculas e Cristais: Fundamentos da Espectroscopia Vibracional, Bookmann, Porto Alegre, 2009.

NAKAMOTO, K.; Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, Theory and Applications in Inorganic Chemistry, 6th Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2009.

SALA, O.; Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho, 2ª Ed., Editora UNESP, São Paulo, 2008.

SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W.; Química Inorgânica, 4ª Ed., Bookman, Porto Alegre, 2008.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1807 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: MECANISMOS DE REAÇÕES INORGÂNICAS

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - TEORIAS DE LIGAÇÃO EM COMPLEXOS

- 1.1 - Teoria do Campo Cristalino (TCC)
- 1.2 - Teoria do Campo Ligante (Orbitais Moleculares - TCL)
- 1.3 - Diagramas dos OM para complexos tetra-, penta- e hexa-coordenados
- 1.4 - Retrodoação eletrônica e efeito nefelauxético

UNIDADE 2 - ESTABILIDADE E REATIVIDADE DE COMPLEXOS

- 2.1 - Termodinâmica e Equilíbrios de Formação de Complexos
- 2.2 - Labilidade e Inércia

UNIDADE 3 - MECANISMOS DE REAÇÃO

- 3.1 - Reações de substituição de ligantes
- 3.2 - Reações de substituição em complexos octaédricos
- 3.3 - Reações de substituição em complexos quadrático-planos
- 3.4 - Reações de substituição em complexos em outras geometrias
- 3.5 - Mecanismos de reações redox
- 3.6 - Correlação estrutura x reatividade
- 3.7 - Reações de adição oxidativa

UNIDADE 4 - MECANISMOS DE ISOMERIZAÇÃO E RACEMIZAÇÃO EM COMPLEXOS

- 4.1 - Mecanismo intermolecular
- 4.2 - Mecanismo intramolecular
- 4.3 - Complexos tris-quelatos
- 4.4 - Complexos bis(bidentados)
- 4.5 - Rearranjo fotoquímico

UNIDADE 5 - REAÇÕES FOTOQUÍMICAS COM METAIS DE TRANSIÇÃO

- 5.1 - Conceitos fotoquímicos básicos
- 5.2 - Reações de fotossustituição
- 5.3 - Reações fotoredox
- 5.4 - Fotoreações em ligantes
- 5.5 - Conversões de energia e fotossíntese artificial

UNIDADE 6 - TRANSFERÊNCIA DE ELÉTRONS

- 6.1 - Mecanismos de esfera interna e externa
- 6.2 - Transferência de elétrons fotoinduzida
- 6.3 - Transferência de energia Foster e Dexter

BIBLIOGRAFIA

- MIESSLER, G. L.; FISCHER, P. J.; TARR, D. A.; Química Inorgânica, 5a Ed., Pearson, São Paulo, 2014.
- JORDAN, R. B.; Reaction Mechanisms of Inorganic and Organometallic Systems, 3rd Ed., Oxford University Press, Oxford, 2007.
- HAY, R. W.; Reaction Mechanisms of Metal Complexes, Horwood Publishing, Chichester, 2000.
- ASPERGER, S.; Chemical Kinetics and Inorganic Reaction Mechanisms, 2nd Ed., Springer, New York, 2003.
- TOMA, H. E.; Coleção de Química Conceitual: Química de Coordenação, Organometálica e Catálise, Vol. 4, Blucher, São Paulo, 2013.
- HUHEEY, J. E., KEITER, E. A.; KEITER, R. L.; Inorganic Chemistry - Principles of Structure and Reactivity, 4th Ed., Harper Collins College Publishers, Glenview, 1993.
- PORTERFIELD, W. W.; Inorganic Chemistry, 1st Ed., Addison-Wesley Publishing Company, Boston, 1984.
- EDWARDS, J. O.; Progress in Inorganic Chemistry - Part II, Vol. 17, Interscience Publishers, Geneva, 1972.



Artigos científicos recentes publicados em periódicos da área sobre o tema.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1808 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: TEORIA DE GRUPO E GRUPOS DE PONTO MOLECULARES

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - ELEMENTOS DE SIMETRIA E OPERAÇÕES

- 1.1 - Conceito de simetria
- 1.2 - Elementos de simetria e operações: Generalidades; Eixo axial (C_p); Plano de espelhamento (σ); Centro de inversão (i); Eixo axial de rotação-espelhamento (S_p)
- 1.3 - Enquadramento do objeto de análise em um sistema de coordenadas cartesianas

UNIDADE 2 - TEORIA DOS GRUPOS DE PONTO

- 2.1 - Propriedades gerais de grupo: Aplicação de axiomas de grupos em grupos de ponto; Tabelas de multiplicação; Grupos de ponto cíclicos; Classes de simetria

UNIDADE 3 - SISTEMÁTICA DOS GRUPOS PONTUAIS MOLECULARES.

- 3.1 - Simbologia
- 3.2 - Tipo I - Grupos não-axiais
- 3.3 - Tipo II - Grupos C
- 3.4 - Tipo III - Grupos D
- 3.5 - Tipo IV - Grupos poliédricos
- 3.6 - Tipo V - Grupos rotacionais
- 3.7 - Decréscimo de simetria
- 3.8 - Organograma para a classificação simetria de ponto molecular

UNIDADE 4 - TABELA DE CARACTERES

- 4.1 - Representação vetorial de graus de liberdade: Definição de grau de liberdade; Representação vetorial
- 4.2 - Molécula angular - AB_2 : Vetores de translação; Vetores rotacionais; Vetores vibracionais; Construção da tabela de caracteres; Leis da tabela de caracteres
- 4.3 - Molécula piramidal - AB_4
- 4.4 - Simbologia de Mulliken
- 4.5 - Formulário geral para caracteres de translação e rotação: Giro axial de um ponto; Eixo axial de rotação (C_p); Centro de inversão (i); Plano de espelhamento (σ); Eixo axial de rotação-espelhamento (S_p)
- 4.6 - Atividade vibracional: Modos vibracionais ativos no infravermelho; Modos vibracionais ativos no RAMAN; Princípio da exclusão

UNIDADE 5 - ANÁLISE VIBRACIONAL

- 5.1 - Formalismo da representação do somatório dos graus de liberdade moleculares
- 5.2 - Formalismo de redução com correlação entre grau de liberdade e espécie de simetria
- 5.3 - Coordenadas internas de uma molécula
- 5.4 - Espectro vibracional de molécula AB_3 - modos vibracionais ativos no infravermelho e RAMAN: Molécula AB_3 com simetria piramidal; Molécula AB_3 com simetria trigonal-planar
- 5.5 - Espectro vibracional de molécula AB_2 - modos vibracionais ativos no infravermelho e RAMAN: Molécula AB_2 angular; Moléculas AB_2 linear
- 5.6 - Modos vibracionais RA E IR ativos na molécula C^O coordenada em derivado de pentacarbonila metálica
- 5.7 - Modos vibracionais RA E IR ativos na molécula com simetria octaédrica regular
- 5.8 - Modos vibracionais RA E IR ativos na molécula com simetria tetraédrica regular
- 5.9 - Modos vibracionais ativos na redução da simetria na molécula com simetria poliédrica T_d e O_h

UNIDADE 6 - ESPECTROS DE INFRAVERMELHO DE CARBONILAS METÁLICAS

- 6.1 - Carbonila metálica com simetria poliédrica O_h e derivada: Tipo $M(CO)_6$; Tipo $M(CO)_5X$; Tipo $M(CO)_4X_2$; Tipo $M(CO)_3X_3$; Tipo $M(CO)_2X_4$
- 6.2 - Carbonila metálica com simetria D_{3h} e derivada: Tipo $M(CO)_5$; Tipo $M(CO)_4X$; Tipo $M(CO)_3X_2$
- 6.3 - Carbonila metálica com simetria poliédrica T_d e derivada: Tipo $M(CO)_4$; Tipo $M(CO)_3X$; Tipo $M(CO)_2X_2$
- 6.4 - Carbonilas metálicas multinucleadas: Tipo $M_2(CO)_{10}$; Tipo $M_2(CO)_9$
- 6.5 - Modos vibracionais ativos na correlação com a simetria local de uma carbonila metálica e derivada: Tipo $M_3(CO)_{12}$; Tipo $h_5-C_5H_5M(CO)_3X$; Tipo $h_5-C_5H_5M(CO)_3$

UNIDADE 7 - CORRELAÇÃO COM A SIMETRIA CRISTALOGRAFICA

- 7.1 - Correlação da simbologia de Hermann-Mauguin com a simbologia de Mulliken
- 7.2 - Classes de simetria unidimensional
- 7.3 - Elementos de simetria e operações de equivalência simétrica em redes e grupos espaciais unidimensionais



- 7.4 - Elementos de simetria e operações de equivalência simétrica em redes e grupos espaciais bidimensionais
- 7.5 - Elementos de simetria e operações de equivalência simétrica em redes e grupos espaciais tridimensionais
- 7.6 - Simetria cristalina - grupos de ponto cristalográficos. Simbologia de Schönflies

BIBLIOGRAFIA

COTTON, F. A.; Chemical Applications of Group Theory, 3rd Ed., John Willey & Sons, Hoboken, 1963.

COTTON, F. A.; Wilkinson, G.; Advanced Inorganic Chemistry, 5th Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 1988.

OLIVEIRA, G. N. M.; Simetria de Moléculas e Cristais: Fundamentos da Espectroscopia Vibracional, Bookmann, Porto Alegre, 2009.

HAHN, T.; International Tables for Crystallography, Vol. A, 5th Ed., The International Union of Crystallography/Springer, New York, 2005.

KUNZE, U.; LORENZ, I.-P.; Gruppentheorie und Molekülsymmetrie (com tradução por solicitação de autorização aos autores).

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1809 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: QUÍMICA SUPRAMOLECULAR - FUNDAMENTOS E APLICAÇÕES

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - QUÍMICA SUPRAMOLECULAR

- 1.1 - Breve histórico
- 1.2 - Nomenclatura IUPAC em química supramolecular
- 1.3 - Conceito de Supramolecularidade
- 1.4 - Uso de macrociclos em química supramolecular

UNIDADE 2 - PROPRIEDADES GERAIS DOS COMPOSTOS SUPRAMOLECULARES

- 2.1 - Ligações e Interações secundárias
- 2.2 - Arranjos Auto-Organizados
- 2.3 - Modelos Hóspede-Hospedeiro (Host-Guest)
- 2.4 - Estereoquímica em Química de Coordenação
- 2.5 - Comportamento Físico-Químico
- 2.6 - Química Supramolecular em Solução e no Estado Sólido

UNIDADE 3 - CARACTERIZAÇÃO DE ARRANJOS AUTO-ORGANIZADOS

- 3.1 - Técnicas espectroscópicas
- 3.2 - Técnicas Espectrométricas
- 3.3 - Técnicas Eletroanalíticas
- 3.4 - Medidas Magnéticas

UNIDADE 4 - CONTROLE METAL/LIGANTE EM SISTEMAS AUTO-ORGANIZADOS

- 4.1 - Estequiometria
- 4.2 - Reações em Atmosfera Ambiente e Inertes
- 4.3 - Estabilidade dos Ligantes
- 4.4 - Estado de Oxidação dos Centros Metálicos

UNIDADE 5 - PROPRIEDADES ÓPTICAS

- 5.1 - Interpretação e análise de espectros
- 5.2 - Sondas UV-vis/NIR
- 5.3 - Sondas Fluorescentes
- 5.4 - Interação com biomoléculas
- 5.5 - Materiais Fotônicos e Óptica Não-Linear

UNIDADE 6 - QUIRALIDADE EM COMPLEXOS POLINUCLEARES DE COORDENAÇÃO

- 6.1 - Conceitos básicos
- 6.2 - Enantiomorfismo
- 6.3 - Complexos Quirais
- 6.4 - Catálise Assimétrica com Compostos de Coordenação
- 6.5 - Aspectos supramoleculares em química biológica

UNIDADE 7 - ELETROCATÁLISE

- 7.1 - Moléculas Eletroativas
- 7.2 - Formação de Filmes em Superfícies Condutoras
- 7.3 - Sondas Redox
- 7.4 - Materiais Moleculares
- 7.5 - Células Solares e OLEDs

BIBLIOGRAFIA

STEED, J. W.; ATWOOD, J. L.; Supramolecular Chemistry, 2nd Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2009.

LEHN, J. M.; Supramolecular Chemistry: Concepts and Perspectives, 1st Ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2006.

GALE, P. A.; STEED, J. W.; Supramolecular Chemistry: From Molecules to Nanomaterials, 1st Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2012.

HUHEEY, J. E.; KEITER, E. A.; KEITER, R. A.; Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity, 4th Ed., Benjamin Cummings, New York, 1997.



COTTON, F. A.; WILKINSON, G.; Advanced Inorganic Chemistry - A Comprehensive Text, 6th Ed., Wiley-Interscience, Hoboken, 1999.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1810 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: QUÍMICA BIOINORGÂNICA

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - Aspectos gerais da química bioinorgânica

- 1.1 - Definições de metais em metaloenzimas e metaloproteínas
- 1.2 - Interações de metais com aminoácidos e ácidos nucleicos
- 1.3 - Metais como comunicadores celulares na biologia
- 1.4 - Biodisponibilidade de íons metálicos

UNIDADE 2 - Enzimas contendo átomos de zinco

- 2.1 - Carboxipeptidase
- 2.2 - Anidrase carbônica
- 2.3 - Fosfatase alcalina
- 2.4 - Álcool desidrogenase
- 2.5 - Proteínas de zinco associadas a regulação da expressão gênica (dedos de zinco)

UNIDADE 3 - Enzimas contendo átomos de ferro

- 3.1 - Transporte e armazenamento de ferro e oxigênio
- 3.2 - Mioglobina e hemoglobina
- 3.3 - Hemeritrina
- 3.4 - Sideróforos e bleomicina

UNIDADE 4 - TRANSFERÊNCIA ELETRÔNICA E PROCESSOS ENZIMÁTICOS REDOX

- 4.1 - Proteínas contendo clusters Fe-S e citocromos
- 4.2 - Centros redox dinucleares
- 4.3 - Citocromos
- 4.4 - Enzimas e proteína contendo cobre

UNIDADE 5 - METAIS DA PRIMEIRA E SEGUNDA SÉRIE DE TRANSIÇÃO EM PROCESSOS BIOLÓGICOS

- 5.1 - Mn-SOD, Mn-Catalase e complexos liberadores de oxigênio (fotossíntese)
- 5.2 - Oxotransferases e nitrogenases
- 5.3 - Coenzima B12
- 5.4 - Haloperoxidases

UNIDADE 6 - TÓPICOS AVANÇADOS

- 6.1 - Metais na medicina moderna
- 6.2 - Complexos de lantanídeos em metodologias de diagnóstico
- 6.3 - Metais para tratamentos oncológicos
- 6.4 - Tratamentos especiais para diabetes e artrites/artroses

BIBLIOGRAFIA

SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W.; Química Inorgânica, 4ª Ed., Bookman, Porto Alegre, 2008.

TOMA, H. E.; Coleção de Química Conceitual: Química Bioinorgânica e Ambiental, Vol. 5, Blucher, São Paulo, 2015.

HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G.; Química Inorgânica, 4ª Ed., Vol. 1 e 2, LTC, Rio de Janeiro, 2013.

REHDER, D.; NORDLANDER, E.; Bioinorganic Chemistry, 1st Ed., Oxford University Press, Oxford, 2014.

STEPHANOS, J. J.; ADDISON, A. W.; Chemistry of Metalloproteins: Problems and Solutions in Bioinorganic Chemistry, 1st Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2014.

KAIM, W.; SCHWEDERSKIB, B.; KLEIN, A.; Bioinorganic Chemistry - Inorganic Elements in the Chemistry of Life: An Introduction and Guide, 2nd Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2013.

KARLIN, K. D. <<http://www.livrariacultura.com.br/busca?Ntt=KARLIN%2C+K.+D.&Ntk=product.collaborator.name>>; TYEKLAR, Z. <<http://www.livrariacultura.com.br/busca?Ntt=TYEKLAR%2C+Z.&Ntk=product.collaborator.name>>; Bioinorganic Chemistry of Copper,



1st Ed., Springer-Verlag, London, 2013.

SCOTT, R. A. <<http://www.livrariacultura.com.br/busca?Ntt=Scott%2C+Robert+A.&Ntk=product.collaborator.name>>; CULOTTA, V <<http://www.livrariacultura.com.br/busca?Ntt=CULOTTA%2C+VALERIA&Ntk=product.collaborator.name>>; Metals in Cells, 1st Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2013.

MERCE, A. L. R.; RECIO, M. A. L.; Molecular And Supramolecular Bioinorganic, 1st Ed., Nova Science Publishers, New York, 2013.

KESSISSOGLOU, D. P. <<http://www.livrariacultura.com.br/busca?Ntt=KESSISSOGLOU%2C+D.+P.&Ntk=product.collaborator.name>>; Bioinorganic Chemistry, 1st Ed., Springer-Verlag, London, 2012.

ALESSIO, E.; Bioinorganic Medicinal Chemistry, 1st Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2011.

KRAATZ, H-B.; METZLER-NOLTE, N.; Concepts And Models In Bioinorganic Chemistry, 1st Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2006.

THORP, H. H.; PECORARO, V. L.; Mechanistic Bioinorganic Chemistry, 1st Ed., Oxford University Press, Oxford, 1996.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1811 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: QUÍMICA DE ORGANOMETÁLICOS DOS ELEMENTOS DE TRANSIÇÃO

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - ASPECTOS GERAIS

- 1.1 - Propriedades e tendências das ligações M-C: Polaridade da ligação M-C
- 1.2 - Tipos de ligantes
- 1.3 - Acidez/basicidade de Lewis e teoria de Pearson aplicada a organometálicos

UNIDADE 2 - LIGANTES s-DOADORES

- 2.1 - Síntese de alquilas e arilas de metais de transição
- 2.2 - Propriedades dos organometálicos com s-doadores
- 2.3 - Estabilidade termodinâmica X labilidade cinética
- 2.4 - Complexos com ligantes perfluorados

UNIDADE 3 - LIGANTES s-DOADORES E p-RECEPTORES

- 3.1 - Complexos com alquenos
- 3.2 - Complexos com alquinos
- 3.3 - Complexos com carbenos
- 3.4 - Complexos com carbinos
- 3.5 - Carbonilas metálicas: Síntese e estrutura; Complexos carbonílicos com pontes; Teoria do orbital molecular aplicada a carbonilas metálicas; Principais reações das carbonilas metálicas
- 3.6 - Isonitrilas metálicas

UNIDADE 4 - LIGANTES s E p-DOADORES E p-RECEPTORES

- 4.1 - Complexos olefínicos
- 4.2 - Complexos com alquinos
- 4.3 - Complexos alílicos
- 4.4 - Complexos poli-enílicos
- 4.5 - Ligantes cíclicos: Cátions ciclopropenila C₃R₃⁺; Ciclobutadieno C₄H₄; Ânions ciclopentadienila C₅H₅⁻
- 4.6 - Metalocenos: Métodos de síntese; Estrutura eletrônica e ligação; Reações dos metalocenos (Metalocenos carbonílicos, Metalocenos halogenados, Metalocenos e hidretos, Metalocenos nitrosílicos)
- 4.7 - Organometálicos derivados de arenos: Métodos de síntese; Estrutura eletrônica e ligação; Principais reações
- 4.8 - Complexos derivados de C₇H₇⁺ e C₈H₈

UNIDADE 5 - LIGAÇÕES INTERMETÁLICAS E FORMAÇÃO DE CLUSTERS

- 5.1 - Critérios para a formação de ligações M-M: Ligações múltiplas M-M
- 5.2 - Estrutura, ligação e contagem de elétrons em clusters
- 5.3 - Analogia isolobal
- 5.4 - Síntese sistemática de clusters

UNIDADE 6 - CATÁLISE ORGANOMETÁLICA

- 6.1 - Contagem de elétrons e catálise
- 6.2 - Hidrogenação de alquenos
- 6.3 - Hidroformilação
- 6.4 - Síntese do ácido acético: processos Monsanto e Cativa
- 6.5 - Reações de acoplamento: Reação de Heck; Reação de Suzuki; Reação de Sonogashira; Reação de Stille
- 6.6 - Processo Wacker
- 6.7 - Metátese de olefinas
- 6.8 - Reações de Fischer-Tropsch
- 6.9 - Oligomerização e polimerização
- 6.10 - Reforma de gás d'água
- 6.11 - Carbonilação de Reppe

UNIDADE 7 - NOÇÕES SOBRE CARACTERIZAÇÃO ESPECTROSCÓPICA DE ORGANOMETÁLICOS

- 7.1 - Espectroscopia vibracional de carbonilas metálicas
- 7.2 - RMN de ¹H e ¹³C em organometálicos
- 7.3 - RMN de metais de transição em complexos organometálicos

UNIDADE 8 - AVANÇOS RECENTES EM QUÍMICA ORGANOMETÁLICA



8.1 - Ligantes hemilábeis
8.2 - Ativação da ligação C-H em alcanos
8.3 - Catálise assimétrica

BIBLIOGRAFIA

ELSCHENBROICH, C.; Organometallics, 3rd Ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2006.

MESSLER, G. L.; FISCHER, P. J.; TARR, D. A.; Química Inorgânica, 5a Ed., Pearson, São Paulo, 2014.

SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W.; Química Inorgânica, 4ª Ed., Bookman, Porto Alegre, 2008.

TOMA, H. E.; Coleção de Química Conceitual: Química de Coordenação, Organometálica e Catálise, Vol. 4, Blucher, São Paulo, 2013.

HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G.; Química Inorgânica, 4ª Ed., Vol. 1 e 2, LTC, Rio de Janeiro, 2013.

CRABTREE, R. H.; The Organometallic Chemistry of the Transition Metals, 4th Ed., Wiley, New York, 2005.

SPESSARD, G. O.; MIESSLER, G. L.; Organometallic Chemistry, 2nd Ed., Oxford University Press, Oxford, 2010.

HUHEEY, J. E.; KEITER, E. A.; KEITER, R. L.; Inorganic Chemistry - Principles of Structure and Reactivity, 4th Ed., Harper Collins College Publishers, New York, 1993.

DOUGLAS, B.; McDANIEL, D.; ALEXANDER, J.; Concepts and Models of Inorganic Chemistry, 3rd Ed., Wiley, New York, 1994.

KETTLE, S. F. A.; Physical Inorganic Chemistry: A Coordination Chemistry Approach, Oxford University Press, Oxford, 2000.

ATKINS, P. W.; OVERTON, T.; ROURKE, J.; WELLER, M.; ARMSTRONG, F.; HAGERMAN, M.; Shriver & Atkins' Inorganic Chemistry, 5th Ed., OUP Oxford, Oxford, 2009.

JORDAN, R. B.; Reaction Mechanisms of Inorganic and Organometallic Systems, 3rd Ed., Oxford University Press, Oxford, 2007.

YAMAMOTO, A.; Organotransition Metal Chemistry, Wiley, New York, 1986.

DUPONT, J.; Química Organometálica: Elementos do Bloco d, Bookman, Porto Alegre, 2005.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1812 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: CRISTALOGRAFIA APLICADA

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - SIMETRIA EM CRISTAIS

- 1.1 - Elementos de simetria
- 1.2 - Retículos
- 1.3 - Grupos pontuais e espaciais
- 1.4 - *International Tables of Crystallography*

UNIDADE 2 - COMPUTAÇÃO CRISTALOGRÁFICA

- 2.1 - Transformações de cela
- 2.2 - Operações nos retículos: cela reduzida de Niggli, sob- e super-retículos, geminação.
- 2.3 - Fatores estruturais
- 2.4 - Cálculo de densidade eletrônica
- 2.5 - Método de quadrados mínimos
- 2.6 - Moção termal
- 2.7 - Parâmetros e suas incertezas padrões

UNIDADE 3 - MÉTODOS EXPERIMENTAIS EM CRISTALOGRAFIA

- 3.1 - Fontes de raios-X
- 3.2 - Coleta de dados para monocristal
- 3.3 - Coleta de dados para material policristalino
- 3.4 - Redução de dados
- 3.5 - Uso dos programas computacionais para redução dos dados

UNIDADE 4 - SOLUÇÃO E REFINAMENTO DE ESTRUTURAS CRISTALINAS

- 4.1 - Estatísticas de amplitudes dos fatores estruturais
- 4.2 - Patterson, métodos diretos e "charge flipping"
- 4.3 - Refinamento da estrutura
- 4.4 - Configuração absoluta
- 4.5 - Método de Reitveld
- 4.6 - Arquivo de informações cristalográficas, CIF
- 4.7 - Uso dos programas computacionais para solução e refinamento de estrutura

UNIDADE 5 - DIAGNOSTICANDO E RESOLVENDO PROBLEMAS CRISTALOGRÁFICOS

- 5.1 - Interpretação da estrutura
- 5.2 - Desordem: substitucional, posicional, complexa.
- 5.3 - Geminação: meroédrica, pseudo-meroédrica e não-meroédrica
- 5.4 - "Constraints" e "restraints"
- 5.5 - Pseudo-simetria
- 5.6 - Artefatos
- 5.7 - Validação da estrutura
- 5.8 - Uso dos programas computacionais para diagnosticar e resolver problemas cristalográficos

BIBLIOGRAFIA

- HAMMOND, C.; The Basics of Crystallography and Diffraction, Oxford University Press, Oxford, 2001.
- GIACOVAZZO, C.; Fundamentals of Crystallography, 3rd Ed., Oxford University Press, Oxford, 2011.
- STOUT, G. H.; JENSEN, L. H.; X-Ray Structure Determination, 2nd Ed., John Wiley & Sons, New York, 1989.
- LADD, M.; PALMER, R.; Structure Determination-Ray Crystallography, 5th Ed., Springer Science, New York, 2013.
- MASSA, W.; Crystal Structure Determination, 2nd Ed., Springer-Verlag, Berlin, 2004.
- MÜLLER, P.; Crystal Structure Refinement: A Crystallographer's Guide to SHELXL, Oxford University Press, Oxford, 2006.
- Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.





Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1813 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: CRISTALOQUÍMICA DE DIFRAÇÃO DE RAIOS-X

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - GENERALIDADES ENVOLVENDO RAIOS-X

- 1.1 - Análise estrutural cristalina por difração de raios-X comparada a microscopia clássica
- 1.2 - Geração e propriedades de raios-X. Geradores de raios-X. Radioproteção.
- 1.3 - Tubo de raios-X: Construção; Cuidados e precauções; Radiação por frenamento de elétrons; Radiação característica
- 1.4 - Interação de Raios-X com a Matéria: Absorção; Filtros
- 1.5 - Monocromatização de raios-X: cristais como monocromadores - monocromador de feixes paralelos. Idem com feixes focados
- 1.6 - Outros efeitos de raios-X: Efeito foto-elétrico; Efeito Compton; Interferência (cristal como uma fenda tridimensional)

UNIDADE 2 - REDE CRISTALINA

- 2.1 - Redes cristalinas: Descrição e parâmetros; Cella unitária e condições de escolha; Classe cristalina; Rede de Bravais; Índices de Miller; Direção e zona cristalográfica; Simetria de difração
- 2.2 - A rede recíproca: Descrição; Reflexão como modelo para a difração (condição de reflexão em redes cristalinas); A equação de Bragg; Círculo e Esfera de Ewald como condição de difração; Aplicação (método do cristal rotatório); Difrátogramas (método de BUERGER); Informações contidas em um difratograma
- 2.3 - Propriedades características de cristais: Homogeneidade; Anisotropia; Cella unitária
- 2.4 - Difrátometro de raios-X para monocristal: princípios fundamentais de construção e funcionamento

UNIDADE 3 - GRUPOS ESPACIAIS

- 3.1 - Elementos de simetria - simbologia de Hermann-Mauguin e correlação com as simbologias de Mulliken e de Schoenflies
- 3.2 - Discussão de celas elementares genéricas envolvendo equivalência por operações de simetria em motivos cristalográficos na parte assimétrica. Construção de grupos espaciais com interpretação de operadores de simetria
- 3.3 - Simetria da rede tridimensional. Classes cristalina. Simetria de Laue
- 3.4 - Formalismo envolvendo a interpretação de grupos espaciais unidimensionais, bidimensionais e tridimensionais
- 3.5 - Formalismo da transformação de grupos espaciais incluindo referência padrão. Matrizes de transformação de coordenadas cristalográficas

UNIDADE 4 - SOLUÇÃO DA ESTRUTURA MOLECULAR E CRISTALINA

- 4.1 - Fase de uma onda. Representação no plano complexo e interpretação da contribuição de espalhamento de átomos contidos em um plano em condição de espalhamento. Dedução e interpretação do formalismo correspondente ao fator estrutural (amplitude de uma estrutura)
- 4.2 - O Problema da Fase
- 4.3 - Interpretação da solução do Problema da Fase com o formalismo da Síntese de Fourier e Fourier Inversa. Representação do mapa da densidade eletrônica e correlação com a estrutura molecular
- 4.4 - Discussão das bases envolvendo os métodos de solução de estrutura molecular: Métodos Diretos. Método de Patterson com dedução da Síntese de Patterson e comentários da simetria dos grupos correspondentes - Grupos de Patterson. Exemplos de solução de estrutura: simetria baseadas em linhas e planos de Harker

UNIDADE 5 - A ESTRUTURA CRISTALINA E MOLECULAR

- 5.1 - Interpretações de estruturas cristalinas e moleculares: representações gráficas. Efeitos de desordem posicional de átomos
- 5.2 - Interações inter e intramoleculares - interações secundárias por ligações não-covalentes
- 5.3 - Arranjos supramoleculares e suas dimensionalidades

UNIDADE 6 - CAMPOS DE APLICAÇÃO DA CRISTALOGRAFIA

- 6.1 - Polimorfismo
- 6.2 - Estratégia para a arquitetura molecular com alvo específico de aplicação

UNIDADE 7 - CORRELAÇÃO DA CRISTALOGRAFIA COM OUTROS MÉTODOS ANALÍTICOS

- 7.1 - Difractometria em amostras pulverizadas
- 7.2 - Fluorescência de raios-X
- 7.3 - Métodos espectroscópicos

BIBLIOGRAFIA

WELLS, A. F.; Structural Inorganic Chemistry, Clarendon Press, G. Britain, 1986.

STOUT, G. H.; JENSEN, L. H.; X-Ray Structure Determination - A Practical Guide, 2nd Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 1989.

Autenticação: DAF1.82DA.E2D9.6CB7.4B7C.18D7.8410.F027 consulte em <http://www.ufsm.br/autenticacao>

Detalhes do documento em <http://portal.ufsm.br/documentos>



LUGER, P.; Modern X-Ray Analysis on Single Crystals, Walter de Gruyter, Berlin, 1980.

HAMMOND, C.; The Basics of Crystallography and Diffraction, Oxford University Press, Oxford, 1997.

WOOLFSON, M. M.; An Introduction to X-Ray Crystallography, 2nd Ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1997.

DESIRAJU, G. R.; STEINER, J.; The Weak Hydrogen Bond In Structural Chemistry and Biology, Oxford University Press, Oxford, 1999.

International Tables for Crystallography, Volume A, Edited by Theo Hahn, Fifth Edition, The International Union of Crystallography/Springer, 2005.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1814 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: QUÍMICA DE ELEMENTOS REPRESENTATIVOS

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - A química dos elementos REPRESENTATIVOS

- 1.1 - Ligações químicas
- 1.2 - Classificação de compostos de hidrogênio
- 1.3 - Os metais do Bloco s
- 1.4 - Os metais do bloco p

UNIDADE 2 - OS GRUPOS DO BORO E DO CARBONO

- 2.1 - Compostos de boro com os elementos eletronegativos
- 2.2 - Síntese de boranos superiores e de boro-hidretos
- 2.3 - Metaloboranos
- 2.4 - Carboranos
- 2.5 - Carbetos
- 2.6 - Compostos de silício com elementos eletronegativos
- 2.7 - Compostos de silício-oxigênio estendidos
- 2.8 - Aluminossilicatos
- 2.9 - Elementos pesados e seus derivados

UNIDADE 3 - QUÍMICA DOS ELEMENTOS DOS GRUPOS 15 A 18

- 3.1 - Haletos
- 3.2 - Óxidos e a química redox aquosa
- 3.3 - Compostos de nitrogênio com fósforo
- 3.4 - Oxigênio e os óxidos do bloco p
- 3.5 - Óxidos metálicos
- 3.6 - Calcogenetos orgânicos (S, Se e Te)
- 3.7 - Sulfetos, selenetos e teluretos metálicos
- 3.8 - Compostos de anéis e agregados do bloco p
- 3.9 - Principais derivados
- 3.10 - Aplicações

BIBLIOGRAFIA

SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W.; OVERTON, T. L.; ROURKE, J. P.; WELLER, M. T.; ARMSTRONG, F. A.; Química Inorgânica, 4ª Ed., Bookman, Porto Alegre, 2008.

MACKAY, K. M.; MACKAY, R. A.; HENDERSON, W.; Introduction to Modern Inorganic Chemistry, 6th Ed., Nelson Thornes, Cheltenham, 1995.

AKIBA, K.-Y.; Organo Main Group Chemistry, John Wiley & Sons, Hoboken, 2011.

SPENCER, J. N.; BODNER, G. M.; RICKARD, L. H.; Chemistry Structure and Dynamics, 5th Ed., John Wiley & Sons, Hoboken, 2011.

DEVILLANOVA, F. A.; DU MONT, W. W.; Handbook of Chalcogen Chemistry - New Perspectives in Sulfur, Selenium and Tellurium, Vol. 1, 2nd Ed., The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2013.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1815 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: TÓPICOS ESPECIAIS EM FÍSICO QUÍMICA I

Objetivos

Conteúdo Programático

BIBLIOGRAFIA

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1816 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: TÓPICOS ESPECIAIS EM FÍSICO-QUÍMICA II

Objetivos

Conteúdo Programático

BIBLIOGRAFIA

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: PROGRAMA PG EM QUÍMICA
Código: QMC1817 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: TÓPICOS ESPECIAIS EM FÍSICO-QUÍMICA III

Objetivos

Conteúdo Programático

BIBLIOGRAFIA

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: PROGRAMA PG EM QUÍMICA
Código: QMC1818 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: TÓPICOS ESPECIAIS EM FÍSICO-QUÍMICA IV

Objetivos

Conteúdo Programático

BIBLIOGRAFIA

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1820 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: FÍSICO-QUÍMICA AVANÇADA II

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - TERMODINÂMICA

- 1.1 - Propriedades de gases
- 1.2 - Leis da termodinâmica
- 1.3 - Entalpia e entropia de Processos Químicos e Físicos
- 1.4 - Energias Livres de Gibbs e Helmholtz
- 1.5 - Potencial químico
- 1.6 - Equilíbrio químico

UNIDADE 2 - EQUILÍBRIO ENTRE FASES

- 2.1 - Dissoluções de gases em líquidos
- 2.2 - Solubilidade de gases em soluções aquosas- Lei de Raoult
- 2.3 - Equilíbrio de fases: sistemas com 1 componente, sistemas com 2 componentes e sistemas com 3 componentes

UNIDADE 3 - ESTRUTURA ATÔMICA E MOLECULAR

- 3.1 - Princípios de mecânica quântica
- 3.2 - Estrutura de átomos hidrogenóides e multieletrônicos
- 3.3 - Teoria de ligação de valência e de orbital molecular
- 3.4 - Orbitais moleculares em sistemas poliatômicos
- 3.5 - Simetria molecular
- 3.6 - Cálculos de orbitais moleculares numéricos

BIBLIOGRAFIA

- ATKINS, P. W.; Physical Chemistry, 6th Ed., Oxford University Press, Oxford, 1994.
- CASTELLAN, G. W.; Fundamentos de Físico-Química, 1ª Ed., LTC, Rio de Janeiro, 1996.
- BUNGE, A. V.; Introdução à Química Quântica, Edgard Blücher Ltda, São Paulo, 1977.
- MOORE, W. J.; Físico-Química, 4ª Ed., Vol. 1 e 2, Edgard Blücher Ltda, São Paulo, 1976.
- PILLA, L.; Físico Química, Vol. 1 e 2, Edgard Blücher Ltda, São Paulo, 1979.
- Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: PROGRAMA PG EM QUÍMICA
Código: QMC1821 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: FÍSICO-QUÍMICA AVANÇADA III

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - Os postulados da Mecânica Quântica

UNIDADE 2 - A EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

UNIDADE 3 - ESTADOS ESTACIONÁRIOS, PROBABILIDADE, OBSERVÁVEIS FÍSICOS, OPERADORES E TEORIA DE MEDIDA

UNIDADE 4 - RELAÇÕES DE INDETERMINAÇÃO

UNIDADE 5 - POTENCIAIS UNIDIMENSIONAIS

5.1 - Potencial degrau

5.2 - Barreira de potencial

5.3 - Poço de potencial

5.4 - Partícula em uma caixa

5.5 - Oscilador harmônico

UNIDADE 6 - MOMENTO ANGULAR

UNIDADE 7 - O ÁTOMO DE HIDROGÊNIO E AS PROPRIEDADES DE ÁTOMOS HIDROGENÓIDES

UNIDADE 8 - SPIN ELETRÔNICO

UNIDADE 9 - ACOPLAMENTO DE MOMENTOS ANGULARES E DE SPIN

UNIDADE 10 - TEORIA DAS PERTURBAÇÕES E CÁLCULO VARIACIONAL

UNIDADE 11 - SISTEMAS DE PARTÍCULAS IDÊNTICAS

UNIDADE 12 - FUNÇÕES DE ONDA ELETRÔNICAS PARA MOLÉCULAS

UNIDADE 13 - TEORIA DO ORBITAL MOLECULAR

BIBLIOGRAFIA

ATKINS P. W.; FRIEDMAN R. S.; Molecular Quantum Mechanics, 3rd Ed., Oxford University Press, Oxford, 1997.

GRIFFITHS D. J.; Mecânica Quântica, 2ª Ed., Pearson, São Paulo, 2011.

LEVINE I.; Quantum Chemistry, 4th Ed., Prentice Hall Inc., New York, 1991.

SZABO A.; OSTLUND N. S.; Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory, Dover Publications, New York, 1989.

JENSEN F.; Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons, New York, 1997.

GASIOROWICS S.; Quantum Mechanics, John Wiley & Sons, New York, 1974.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: DEPARTAMENTO DE QUÍMICA
Código: QMC1822 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: MÉTODOS INSTRUMENTAIS EM FÍSICO-QUÍMICA

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - INTRODUÇÃO

- 1.1 - Propriedades físico-químicas
- 1.2 - Aspectos cinéticos
- 1.3 - Aspectos termodinâmicos
- 1.4 - Estratégias de análise
- 1.5 - Técnicas hífenadas

UNIDADE 2 - ESPECTROSCOPIA VIBRACIONAL

UNIDADE 3 - ESPECTROSCOPIA ELETRÔNICA

UNIDADE 4 - MÉTODOS DE RESSONÂNCIA

BIBLIOGRAFIA

McQUARRIE, D. A.; SIMON, J. D.; Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books, Sausalito, 1997.

ATKINS, P. W.; DE PAULA, J.; Físico-Química, 9ª Ed., Vol. 1, LTC, São Paulo, 2012.

WILLIAMS, D. B.; CARTER, C. B.; Transmission Electron Microscopy: A Textbook for Materials Science, 2nd Ed., Plenum Press, New York, 2009.

MURPHY, D. B.; DAVIDSON, M. W.; Fundamentals of Light Microscopy and Electronic Imaging, 2nd Ed., Wiley-Blackwell, Hoboken, 2012.

GOODWIN, J. W.; HUGHES, L. G.; Rheology for Chemists: An Introduction, 2nd Ed., RSC Publishing, Cambridge, 2008.

ELLIS, A. M.; FEHER, M.; WRIGHT, T. G.; Electronic and Photoelectron Spectroscopy: Fundamentals and Case Studies, Cambridge University Press, Cambridge, 2005.

BORSALI, R.; PECORA, R.; Soft-Matter Characterization, Vol. 1 & 2, Springer, New York, 2008.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.



Programa de disciplina de graduação

Dados da Disciplina

Departamento: PROGRAMA PG EM QUÍMICA
Código: QMC1824 **Carga Horária** 45 **Créditos:** 3
Nome: FÍSICO-QUÍMICA DE MACROMOLÉCULAS

Objetivos

Conteúdo Programático

PROGRAMA

UNIDADE 1 - ESTRUTURA E PROPRIEDADES DE MACROMOLÉCULAS

1.1 - Peso molecular

1.2 - Morfologia e propriedades: Forças intermoleculares; Estado amorfo - reologia; Temperatura de transição vítrea; Estereroquímica; Cristalinidade; Sistemas reticulados; Blendas

1.3 - Estrutura e propriedades: Métodos de fabricação; Propriedades mecânicas; Comportamento térmico; Reatividade química; Condutividade elétrica/iônica; Óptica não-linear

UNIDADE 2 - POLÍMEROS EM SOLUÇÃO

2.1 - Termodinâmica clássica e estatística de soluções poliméricas

2.2 - Teoria de Flory-Huggins

2.3 - Densidade de energia coesiva

2.4 - Separação de Fase

2.5 - Pressão osmótica

2.6 - Teoria de Flory-Krigbaum

2.7 - Temperatura teta

2.8 - Determinação da massa molar por osmometria e viscosidade

2.9 - Espalhamento de Luz Estático e Dinâmico

BIBLIOGRAFIA

STEVENS, M. P.; Polymer Chemistry: An Introduction, 3rd Ed., Oxford University Press, Oxford, 1999.

MATYJASZEWSKI, K.; DAVIS, T. P.; Handbook of Radical Polymerization, 1st Ed., Wiley-Interscience, Hoboken, 2002.

MATYJASZEWSKI, K.; GNANOU, Y.; LEIBLER, L.; Macromolecular Engineering, 1st Ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2007.

BORSALI, R.; PECORA, R.; Soft-Matter Characterization, Vol. 1 e 2, Springer, New York, 2008.

CHAN, C. M.; Polymer Surface Modification and Characterization, Hanser Gardner Publications, New York, 1993.

LAZZARI, M.; LIU, G.; LECOMMANDOUX, S.; Block Copolymers in Nanoscience, 1st Ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2006.

SHONAIKE, G. O.; ADVANI, S. G.; Advanced Polymeric Materials: Structure Property Relationships, CRC Press, Boca Raton, 2003.

TERAOKA, I.; Polymer Solutions: An Introduction to Physical Properties, John Wiley & Sons, New York, 2002.

YAMAKAWA, H.; Modern Theory of Polymer Solutions, Harper & Row, New York, 1971.

Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área.