



UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
Centro de Ciências Exatas
Programa de Pós-Graduação em Química

Grade de Disciplinas do Programa de Pós-Graduação em Química



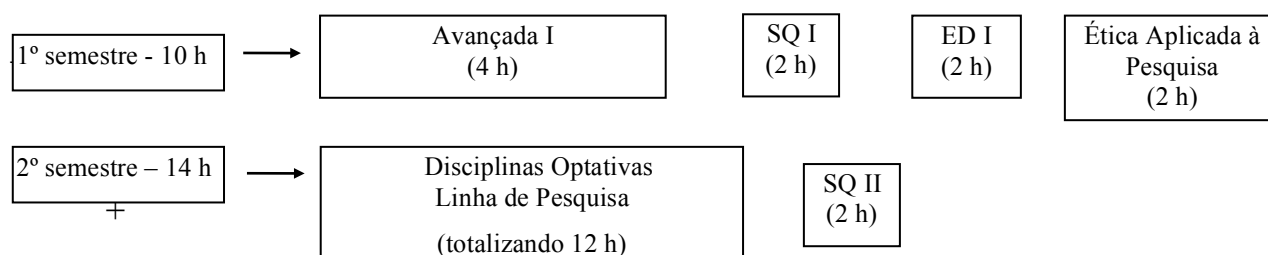
Campus Universitário Alair de Queiroz Araújo – Av. Fernando Ferrari, 514 – Goiabeiras, Vitória – ES | 29075-910 |
Tel. e Fax: (27) 4009-2924 | <http://www4.quimica.vitoria.ufes.br> | ppgq.ufes@gmail.com

DISCIPLINAS

Os números mínimos de créditos exigidos para o curso de mestrado será de 24 (vinte e quatro) e para o curso de doutorado 36 (trinta e seis), determinados de acordo com a Resolução N^o11/10, que regulamenta os cursos de Pós-Graduação dentro da UFES.

Curso de Mestrado:

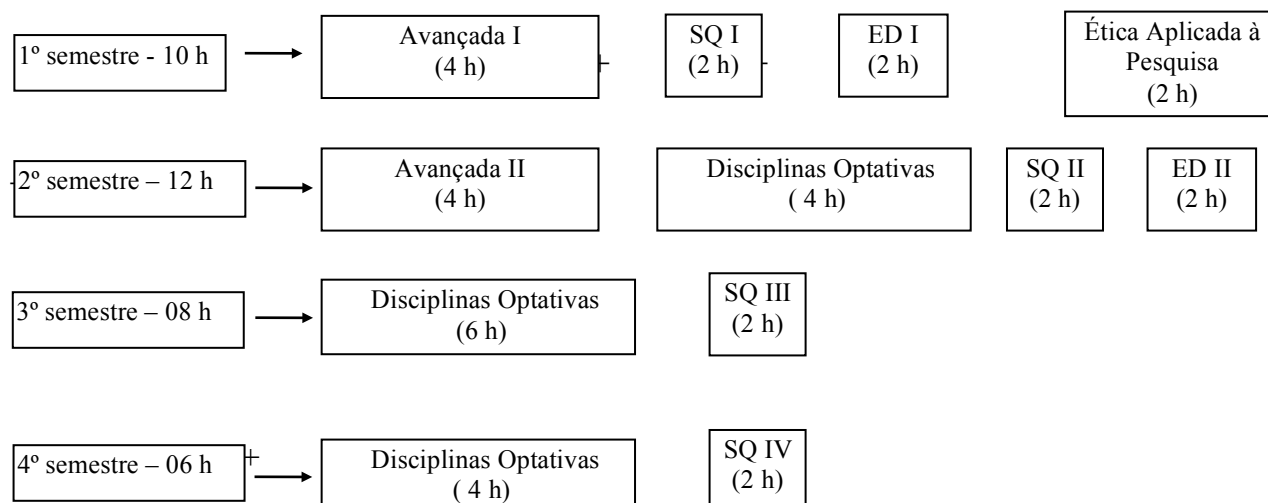
O aluno do curso de Mestrado terá que cursar 24 (vinte e quatro) créditos, sendo 12 (doze) em disciplinas obrigatórias, assim distribuídas: uma disciplina avançada da área de concentração escolhida valendo 04 (quatro) créditos, duas disciplinas de Seminários em Química (I e II) valendo cada uma 02 (dois) créditos, no total de 04 (quatro) créditos, Estágio em Docência I (ED) que equivale a 02 (dois) créditos e 02 (dois) créditos em Ética Aplicada à Pesquisa, totalizando 12créditos. Os 12 (doze) créditos restantes deverão ser cursados em disciplinas optativas relacionadas à linha de pesquisa escolhida.



Curso de Doutorado:

O aluno do curso de Doutorado terá que cursar 36 (trinta e seis) créditos, sendo 22 (vinte) em disciplinas obrigatórias, assim distribuídas: duas disciplinas avançadas da área de concentração escolhida valendo 04 (quatro) créditos cada, totalizando 8 (oito) créditos; quatro disciplinas de Seminários em Química (I, II, III e IV) valendo cada uma 02 (dois) créditos, no total de 08 (oito) créditos; Estágio em Docência I e II valendo 02 (dois) créditos cada uma, 04 (quatro) créditos no total e 02 (dois) créditos em Ética Aplicada à Pesquisa; totalizando os 22 créditos. Os 14 (dezesesseis) créditos restantes deverão ser cursados em disciplinas optativas relacionadas à linha de pesquisa escolhida.

Mesmo que o aluno de Doutorado tenha o aproveitamento total dos 24 créditos, máximo permitido (Art.14 e seu inciso primeiro do Regimento Interno PPGQUI), obtidos no curso de Mestrado, ele terá que cumprir todas as disciplinas obrigatórias supracitadas para o curso de doutorado.



As disciplinas são distribuídas da seguinte maneira:

I-Disciplinas Obrigatórias:

Código	Disciplina	CHS	Créditos	pré-requisito
PQUI300	Seminários em Químical ^{M/D}	2	2	Sem
PQUI301	Seminários em Química II ^{M/D}	2	2	Sem
PQUI302	Seminários em Química III ^D	2	2	Sem
PQUI303	Seminários em Química IV ^D	2	2	Sem
PQUI304	Estágio em Docência I ^{M/D}	2	2	Sem
PQUI305	Estágio em Docência II ^D	2	2	Sem
PQUI306	Ética Aplica à Pesquisa ^{M/D}	2	2	Sem
PQUI307	Química Inorgânica Avançada I ^{M/D}	4	4	Sem
PQUI308	Química Inorgânica Avançada II ^D	4	4	PQUI307
PQUI309	Físico-Química Avançada I ^{M/D}	4	4	Sem
PQUI310	Físico-Química Avançada II ^D	4	4	PQUI309
PQUI311	Química Orgânica Avançada I ^{M/D}	4	4	Sem
PQUI312	Química Orgânica Avançada II ^D	4	4	PQUI311
PQUI313	Química Analítica Avançada I ^{M/D}	4	4	Sem
PQUI314	Química Analítica Avançada II ^D	4	4	PQUI313

M- Obrigatória Mestrado; D – Obrigatória Doutorado

II-Disciplinas Optativas:

II.1) Relacionadas à Área de Concentração/Linha de Pesquisa

Código	Disciplina	CHS	Créditos	pré-requisito
PQUI315	Estrutura e Espectroscopia em Química Inorgânica	4	4	PQUI307
PQUI316	Mecanismos de Reações Inorgânicas	4	4	Sem
PQUI317	Química dos Compostos Organometálicos	4	4	Sem
PQUI318	Fundamentos de Análise Térmica	4	4	Sem
PQUI319	Tópicos Avançados em Química Inorgânica	4	4	PQUI307
PQUI320	Eletroquímica	4	4	Sem
PQUI321	Modelagem Molecular	4	4	Sem
PQUI322	Análise Multivariada de Dados	4	4	Sem
PQUI323	Espectroeletróquímica	4	4	Sem
PQUI324	Tópicos Avançados em Físico Química	4	4	PQUI309
PQUI325	Síntese Orgânica	4	4	PQUI311
PQUI326	Análise Orgânica	4	4	Sem
PQUI327	Fitoquímica	4	4	Sem
PQUI328	Tópicos Avançados em Química Orgânica	4	4	PQUI311
PQUI329	Química Ambiental Avançada	4	4	Sem
PQUI330	Métodos de Espectrometria Atômica	6	5	Sem
PQUI331	Métodos Eletroanalíticos	6	5	Sem
PQUI332	Planejamento de Experimentos	4	4	Sem
PQUI333	Tópicos Avançados em Química Analítica	4	4	PQUI313
PQUI334	Técnicas Modernas de RMN	6	5	Sem
PQUI335	Métodos de RMN no Estado Sólido	6	5	Sem

PQUI336	Espectrometria de Massas: Fundamentos e Aplicações	6	5	Sem
PQUI337	Química do Petróleo	4	4	Sem
PQUI338	Biocombustíveis: Aspectos Tecnológicos	4	4	Sem
PQUI339	Métodos Analíticos e Físico-Químicos Aplicados em Petróleo	4	4	Sem
PQUI340	Tópicos em Emulsões e Compatibilidade de Petróleo	4	4	Sem
PQUI341	Química forense	4	4	Sem

OBS.:

As disciplinas de Tópicos Avançados em Química Inorgânica, Físico Química, Química Orgânica e Química Analítica, com carga horária de 4 horas semanais e com ementário e programas em aberto, serão ofertadas para atender interesses específicos dos projetos de pesquisa em qualquer uma das linhas de pesquisa do PPGQUI ou das oportunidades disponíveis com a presença de professores visitantes.

II.2-Disciplinas de Aspectos Gerais

Código	Disciplina	CHS	Créditos	pré-requisito
PQUI342	Inovação e Empreendedorismo na Química	2	2	Sem
PQUI343	Propriedade Intelectual e Inovação – Foco em Proteção Patentária	2	2	Sem

EMENTA DAS DISCIPLINAS

As ementas propostas para as disciplinas e as suas respectivas bibliografias são as seguintes:

I – Disciplinas Obrigatórias:**PQUI300 - Seminários em Química I(2h semanais; 02 créditos)**

Assuntos de interesse atual na área de Química a serem apresentados pelos cursandos, docentes e visitantes.

Bibliografia: Será de acordo com temas de artigos recentes publicados na literatura.

PQUI301 - Seminários em Química II (2 h semanais; 02 créditos)

Assuntos de interesse atual na área de Química a serem apresentados pelos cursandos, docentes e visitantes.

Bibliografia: Será de acordo com temas de artigos recentes publicados na literatura.

PQUI302 - Seminários em Química III (2 h semanais; 02 créditos)

Assuntos de interesse atual na área de Química a serem apresentados pelos cursandos, docentes e visitantes.

Bibliografia: Será de acordo com temas de artigos recentes publicados na literatura.

PQUI303 - Seminários em Química IV (2 h semanais; 02 créditos)

Assuntos de interesse atual na área de Química a serem apresentados pelos cursandos, docentes e visitantes.

Bibliografia: Será de acordo com temas de artigos recentes publicados na literatura.

PQUI304 - Estágio em Docência I (2 h semanais; 02 créditos)

Participação de alunos de pós-graduação em atividade de ensino da graduação, tais como: ministrar aulas teóricas e práticas, participação em avaliação parcial de conteúdos programáticos, teóricos e práticos, aplicação de métodos ou técnicas pedagógicas tais como estudo dirigido, seminários, e outros, com o acompanhamento do professor responsável pela disciplina. A participação de alunos de pós-graduação em atividades de ensino de graduação da UFES é uma complementação da formação pedagógica dos pós-graduandos e tornou-se uma exigência da CAPES

Bibliografia: Será adotada na ementa do curso de graduação em Química da UFES.

PQUI305- Estágio em Docência II (2 h semanais; 02 créditos)

Participação de alunos de pós-graduação em atividade de ensino da graduação, tais como: ministrar aulas teóricas e práticas, participação em avaliação parcial de conteúdos programáticos, teóricos e práticos, aplicação de métodos ou técnicas pedagógicas tais como estudo dirigido, seminários, e outros, com o acompanhamento do professor responsável pela disciplina. A participação de alunos de pós-graduação em atividades de ensino de graduação da UFES é uma complementação da formação pedagógica dos pós-graduandos e tornou-se uma exigência da CAPES

Bibliografia: Será adotada na ementa do curso de graduação em Química da UFES.

PQUI306 - Ética Aplicada à Pesquisa (2 h semanais; 02 créditos)

Introdução ao estudo da Ética (conceituação, origem e teorias)- Cidadania, Saúde e Ética. Ética na prática cotidiana. Ética em Pesquisa em geral e na Química em particular. A Ética e a produção do conhecimento hoje - Diretrizes e normas regulamentadoras da pesquisa com seres humanos e animais. As resoluções da Comissão Nacional de Ética (CONEP) - Representação de usuários em Comitês de Ética em Pesquisa (CEPs); Ética na Pesquisa em países em desenvolvimento – a experiência brasileira. Solução de problemas éticos e estudos de casos. O Código de Ética dos Profissionais da Química no Brasil e suas implicações legais.

Bibliografia:

BRASIL. Ministério da Ciência e Tecnologia. Leis e resoluções sobre o tema em questão
COELHO, F. Competição, sucesso e ética em ciência. Química Nova, 29, n2. Editorial. 2006.
CORTINA, A.; MARTINEZ, E. Ética. São Paulo: Loyola, 2005.
KOVAC, J. The Ethical Chemist, Upper Saddle River: Pearson Education. 2004.
NOVAES, A. Ética. São Paulo: Cia. das Letras: Secretaria Municipal de Cultura, 1992.
RIOS, T. Ética e competência. São Paulo: Cortez, 1994.
VARELA, F. J. Sobre a competência ética. Lisboa: Ed. 70, 1995.

PQUI307 - Química Inorgânica Avançada I (4 h semanais; 04 créditos)

Química de ácido e base: Conceitos de ácidos e bases; Conceito de Pearson. Estrutura molecular e ligação (Teoria de ligação de valência, campo cristalino e orbital molecular). Simetria molecular: Elementos de simetria, operações de simetria e grupo de ponto. Química em soluções aquosa e não aquosa.

Bibliografia:

COTTON, F. A.; WILKINSON, G.; MURILLO, C. A.; BOCHMANN, M. **Advanced inorganic chemistry**. 6th ed. Wiley-Interscience, 1999.

COTTON, F. A. **Chemical application of group theory**. 3rd ed. New York: Wiley Interscience, 1990.

ESPENSON, J. H. **Chemical Kinetics and Reaction Mechanisms**. 2nd ed. McGraw-Hill, 2002.

HERZBERG, G. **Atomic Spectra and Atomic Structure**. 2nd ed. Dover Publications, 2010.

HUHEEY, J. E. **Inorganic chemistry: principles of structure and reactivity**. Dorling Kindersley Pvt Ltd, 2008.

MISSLER, G. L.; TARR, D. A. **Inorganic Chemistry**. 4th ed. Prentice Hall, 2010.

PQUI308 - Química Inorgânica Avançada II (4 h semanais; 04 créditos)

Química de coordenação: Estrutura e reatividade de compostos de coordenação. Modelos de ligação para complexos: Teoria de ligação de valência, Teoria de campo ligante e Teoria de orbital molecular. Espectro eletrônico e propriedade magnética em complexos.

Bibliografia:

COTTON, F. A.; WILKINSON, G.; MURILLO, C. A.; BOCHMANN, M. **Advanced inorganic chemistry**. 6th ed. Wiley-Interscience, 1999.

HUHEEY, J. E. **Inorganic chemistry: principles of structure and reactivity**. Dorling Kindersley Pvt Ltd, 2008.

KAHN, O. **Molecular Magnetism**. Vch Pub, 1993.

KETTLE, S. F. A. **Physical Inorganic Chemistry: A Coordination Chemistry Approach**. Oxford University Press, 1997.

SOLOMON, E. I.; LEVER, A. B. P. **Inorganic Electronic Structure and Spectroscopy**. Volume I e II. Wiley-Interscience, 2006.

PQUI309 - Físico-Química Avançada I (4 h semanais; 04 créditos)

Natureza e limitação da termodinâmica no equilíbrio. Energia e a primeira e lei da termodinâmica. Entropia e a segunda e lei da termodinâmica. Funções auxiliares e condições de equilíbrio. A terceira lei da termodinâmica e as entropias absolutas.

Bibliografia:

BERRY, R. S; RICE, S. A.; ROSS, J. **Physical Chemistry**. 2nd ed. Oxford University Press. 2000.

CALLEN, H. B. **Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics**. John Wiley, New York. 1985.

DILL, K; BROMBERG, S. **Molecular Driving Forces: Statistical Thermodynamics in Biology, Physics and Nanoscience**, 2nd ed. Garland Science. 2010.

KLOTZ I. M., ROSENBERG R. M. **Chemical Thermodynamics** 7th ed., Wiley & Sons. 2008.

LEVINE, I. N. **Physical Chemistry**. 6th ed. New York: McGraw-Hill. 2008.

McQUARRIE, D. A. and SIMON, J. D. **Molecular Thermodynamics**. University Science Books. 1999.

METIU, H. **Physical Chemistry: Thermodynamics**. 1st ed. Taylor & Francis, 2006.

PQUI310 - Físico-Química Avançada II (4 h semanais; 04 créditos)

Propriedades termodinâmicas fundamentais. Termodinâmica de formação de soluções: soluções ideais e soluções não ideais. Equilíbrio químico em solução. Equilíbrio de fases: fugacidades em misturas líquidas. Introdução à termodinâmica estatística de soluções líquidas.

Bibliografia:

BERRY, R. S; RICE, S. A.; ROSS, J. **Physical Chemistry**. 2nd ed. Oxford University Press, 2000.

CALLEN, H. B. **Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics**. John Wiley, New York, 1985.

DILL, K; BROMBERG, S. **Molecular Driving Forces: Statistical Thermodynamics in Biology, Physics and Nanoscience**, 2nd ed. Garland Science. 2010.

KLOTZ I. M., ROSENBERG, R. M. **Chemical Thermodynamics**, 7th ed., Wiley & Sons., 2008.

LEVINE, I. N. **Physical Chemistry**. 6th ed. New York: McGraw-Hill. 2008.

McQUARRIE, D. A.; SIMON, J. D. **Molecular Thermodynamics**. University Science Books. 1999.

METIU, H. **Physical Chemistry: Thermodynamics**. 1st ed. Taylor & Francis. 2006.

POLING, B. E., PRAUNITZ, J. M., O'CONNELL, J. P. **The Properties of Gases and Liquids**. 5th. McGraw-Hill Professional. 2000.

PRAUNITZ, J. M., LICHTENTHALER, R. N., AZEVEDO, E. G., **Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria**. 3rd ed. Prentice-Hall Inc, Englewood Cliffs, 1998.

PQUI311 - Química Orgânica Avançada I – (4 h semanais; 04 créditos)

Ligação Química e Estrutura Molecular; Efeitos Energéticos e Estereoelétrônicos em Reações Orgânicas; Princípios Estereoquímicos; Ácidos e Bases; Métodos de Determinação de Mecanismos de Reações; Intermediários Reativos em Química Orgânica; Reações de substituição Nucleofílica Alifática e Reações de eliminação.

Bibliografia:

ANSLYN, E. V.; DOUGHERTY, D. A. **Modern Physical Organic Chemistry**, University Science Books, 2006.

BRUCKNER, R. **Organic Mechanisms: Reactions, Stereochemistry and Synthesis**. 2th ed. Springer. 2010.

CAREY, F.A. and SUNDBERG, R.J. **Advanced Organic Chemistry**. Part A: Structure and Mechanisms. 5th ed. New York : Plenum Press. 2007.

CAROLL, F. A. **Perspective on Structure and Mechanism in Organic Chemistry**. 2th ed. New York: Wiley. 2010.

CLAYDEN, J.; GREEVES, N.; WARREN, S. **Organic Chemistry**, Oxford, 2th Ed.; 2012.

FLEMING I. **Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions - Reference Edition**, Wiley, 2th Ed.; 2010.

LOWRY, T.H. and RICHARDSON, K.S. **Mechanism and Theory in Organic Chemistry**. 3th ed. New York: Harper & Row. 1987.

MARCH, J. and SMITH, M. B. **Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms and Structure**. 7th ed. New York : Wiley. 2012.

PQUI312 – Química Orgânica Avançada II (4 h semanais; 04 créditos)

Mecanismos: Substituição eletrofílica e nucleofílica aromática; Adição a ligações múltiplas carbono-carbono e carbono-heteroátomo; Reações pericíclicas; Rearranjos Moleculares; Mecanismos envolvendo organometálicos.

Bibliografia:

ANSLYN, E. V.; DOUGHERTY, D. A. **Modern Physical Organic Chemistry**, University Science Books, 2006.

BRUCKNER, R. **Organic Mechanisms: Reactions, Stereochemistry and Synthesis**. 2th ed. Springer. 2010.

CAREY, F.A. and SUNDBERG, R.J. **Advanced Organic Chemistry**. Part A: Structure and Mechanisms. 5th ed. New York : Plenum Press. 2007.

CAROLL, F. A. **Perspective on Structure and Mechanism in Organic Chemistry**. 2th ed. New York: Wiley. 2010.

CLAYDEN, J.; GREEVES, N.; WARREN, S. **Organic Chemistry**, Oxford, 2th Ed.; 2012.

FLEMING I. **Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions** - Reference Edition, Wiley, 2th Ed.; 2010.

LOWRY, T.H. and RICHARDSON, K.S. **Mechanism and Theory in Organic Chemistry**. 3th ed. New York: Harper & Row. 1987.

MARCH, J. and SMITH, M. B. **Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms and Structure**. 7th ed. New York : Wiley. 2012.

PQUI313 - Química Analítica Avançada I (4 h semanais; 04 créditos)

Propriedades termodinâmicas e cinéticas de equilíbrio. Efeitos não-ideais e interferência no desempenho analítico. Atividade. Métodos matemáticos e gráficos de cálculo do equilíbrio ácido-base, complexação, precipitação e oxi-redução. Diagramas de distribuição de espécies. Cálculos de equilíbrio na especiação química.

Bibliografia:

BURGOT, J. **Ionic Equilibria in Analytical Chemistry**. 1st ed. New York: Springer. 2012. 770p.

BUTLER, J. N.; **Ionic Equilibrium: A Mathematical Approach**. Reading Addison-Wesley, 1964. 547p.

BUTLER, J. N. **Ionic equilibrium: solubility and pH calculations**. New York: John Wiley, 1998. 559p.

MEITES, L. **An Introduction to Chemical Equilibrium and Kinetics**. 1st. ed. Oxford: Pergamon Press, 1981.

SNOEYINK, V. L.; JENKINS, D. **Water Chemistry**. New York: John Wiley, 1980. 480p.

VALCÁRCEL, M. **Principles of Analytical Chemistry: a Text Book**. New York: Springer-Verlag. 2000. 371p.

Publicação em periódicos científicos de circulação internacional (Analytical Chemistry, Analytica Chimica Acta, Analytical Letters, Water Research, Environmental Science Technology, Talanta, Phytochemistry, Journal of Chromatography, etc.)

PQUI314 - Química Analítica Avançada II (4 h semanais; 04 créditos)

Metrologia e validação de metodologia. Preparo de amostras para análise química. Aspectos avançados da análise de traços. Análise em fluxo. Estratégias analíticas para estudo metaloproteômico

Bibliografia:

ARRUDA, M.A.Z. **Trends in Sample Preparation**. 1st ed. Nova Science Pub Inc. 2007.

PAWLISZYN, J.; LORD, H. L. **Handbook of Sample Preparation**. 1st ed. Wiley-Blackwell. 2010.

DOQ-CGCRE-008 - REVISÃO 04. **Orientação sobre Validação de Métodos Analíticos**. INMETRO. Rio de Janeiro, JUL/2011.

EURACHEM WORKING GROUP. **The Fitness for Purpose of Analytical Methods - A Laboratory Guide to Method Validation and Related Topics**. 1st edition. UK. 1998.

ELLISON S. L. R.; ROSSLEIN M.; WILLIAMS A. **Determinando a Incerteza na Medição Analítica**. EURACHEM/CITAC, 2002.

FANG, Z. **Flow Injection separation and Preconcentration**. 1st ed. New York: John Wiley, 1993.

LBERTAZZI, A. S. **Fundamentos de Metrologia Científica e Industrial**. Manole: 2008.

MESTER, Z.; STURGEON, R. **Sample preparation for trace element analysis**. Vol XLI. Amsterdam: Elsevier, 2003.

TROJANOWICZ, M. **Flow Injection Analysis: Instrumentations and Applications**. 1st ed. World Sci. Pub. 2000.

PQUI315 - Estrutura e Espectroscopia em Química Inorgânica (4 h semanais; 04 créditos)

Espectroscopia aplicada ao estudo de compostos de coordenação: infravermelho, Raman, eletrônico (ultravioleta e visível) e fluorescência

Bibliografia:

BUTLER, I. S.; HARROD, J. F. **Inorganic chemistry: principles and applications**. Benjamin, 1989.

COLTHUP, N. B.; DALY, L. H.; WIBERLEY, S. E. **Introduction to Infrared and Raman Spectroscopies**. 3rd ed. Academic Press, 1990.

KITAI, A. H. **Luminescent materials and applications**. Wiley Series in Materials for Electronic & Optoelectronic Applications, 2008.

NAKAMOTO, K. **Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, Applications in Coordination, Organometallic, and Bioinorganic Chemistry**. Part A and B. Wiley-Interscience, 2009.

SOLOMON, E. I.; LEVER, A. B. P. **Inorganic Electronic Structure and Spectroscopy**. Volume I e II. Wiley-Interscience, 2006.

PQUI316 - Mecanismos de Reações Inorgânicas (4 h semanais; 04 créditos)

Determinação das leis de velocidade. Dedução dos mecanismos envolvendo complexos de metais de transição. Mecanismos de reações em complexos octaédricos e quadrados planares. Estereoquímica. Reações redox.

Bibliografia:

BASOLO, F.; PEARSON, R. G. **Mechanism of inorganic reaction: a study of metal complexes in solution**. 2nd ed. John Wiley, 1973.

BURGESS, J.; TOBE, M. L. **Inorganic reaction mechanism**. Prentice Hall, 2000.

RICH, R. **Inorganic Reactions in Water**. Springer, 2009.

RORABACHER, D. B.; ENDICOT, J. F. **Mechanistic aspects of inorganic reactions**. American Chemical Society, 1982.

TAUBE, H. **Electron transfer reactions of complex ion in solution**. Academic Press, 1970.

WILKINS, R. G. **Kinetics and mechanism of reactions of transition metal complexes**. 2nd ed. rev. VCH, 1991.

PQUI317 - Química dos Compostos Organometálicos (4 h semanais; 04 créditos)

Princípios e propriedades gerais de compostos organometálicos. Síntese e mecanismo de reação. Aplicação de compostos organometálicos: síntese orgânica, nanopartículas e química verde.

Bibliografia:

COTTON, F. A.; WILKINSON, G.; MURILLO, C. A.; BOCHMANN, M. **Advanced inorganic chemistry**. 6th ed. Wiley-Interscience, 1999.

CRABTREE, R. H. **The Organometallic Chemistry of the Transition Metals**. 5 ed. Wiley, 2009.

DUPONT, J. **Química Organometálica – Elementos do Bloco d**. Bookman, 2005

SPESSARD, G. O.; MIESSLER, G. L. **Organometallic Chemistry**. 2nd ed. Oxford University Press, 2009.

PQUI318 – Análise Térmica (4 h semanais; 04 créditos)

Análise Termogravimétrica (TG). Análise Térmica Diferencial (DTA), Análise Exploratória Diferencial (DSC). Análise Térmica acoplada à Massa (TG/CG/MS). Parâmetros de Medidas. Equipamentos e Acessórios. Aplicações de Análise Térmica.

Bibliografia:

DANIELS, T. **Thermal Analysis**, Halsted Press, 1973.

HAINES, P.; LAYE, P. G.; WARRINGTON, S. B.; HEAL, G. R. **Principles of Thermal Analysis and Calorimetry**. Royal Society of Chemistry, 2002.

WENDLANDT, W. W. **Thermal Analysis**. 3th ed. Wiley Interscience, 1986.

PQUI319 – Tópicos Avançados em Química Inorgânica (4 h semanais; 04 créditos)

Ementa e bibliografia em aberto. Será dada de acordo com temas das linhas de pesquisa da área de Química Inorgânica.

PQUI320 - Eletroquímica (4 h semanais; 04 créditos)

Eletroquímica de soluções, Interface eletrodo-solução, Dupla camada elétrica, Condição de Equilíbrio, Eletrodos Polarizados e não Polarizados, Processos Eletródicos, Sobrepotencial de ativação, Sobrepotencial de Difusão, Sobrepotencial de Cristalização, Técnicas eletroquímicas: Galvanostática, Potenciostática, Potenciodinâmica e Impedância eletroquímica. Eletroquímica Aplicada: Eletrodeposição, Corrosão, Baterias, Crescimento de Filmes Semicondutores, Eletroquímica Ambiental

Bibliografia:

BOCKVIS, J. O. M.; Reddy, A. K. N. *Modern Electrochemistry*, Plenum Press, 1978, vol.1.

VETTER, K. J. *Electrochemical Kinetics. Theoretical and Experimental Aspects*, Academic Press, 1967.

BARD, A. J.; Faulkner, L. R. *Electrochemical Methods*, John Wiley and Sons, 1980.

PQUI321 – Modelagem Molecular (4 h semanais; 04 créditos)

Programas gráficos e representação estrutural de moléculas. Cálculos mecânica molecular, semi-empíricos e ab-initio e DFT usando programas específicos de modelagem molecular.

Bibliografia:

CRAMER, C. J. **Essentials of Computational Chemistry-Theories and Models**. 3a. ed. New York: John Wiley & Sons. 2002.

LEVINE, I. N. **Química Cúantica**. 5a. ed. Madrid: Pearson Education. 2001

MUELLER, M. **Fundamentals of Quantum Chemistry**, 1a. ed. New York: Kluwer Academic/Plenum. 2002.

ROGERS, D. W. **Computational Chemistry Using the PC**. 3a. ed. New Jersey: John Wiley & Sons. 2003.

PQUI322 – Análise Multivariada de Dados (4 h semanais; 04 créditos)

Organização e pré-processamento de dados multivariados. Métodos de reconhecimento de padrões supervisionados e não supervisionados Regressão multivariada de dados. Quimiometria aplicada a dados espectroscópicos e cromatográficos. Introdução ao tratamento de dados Multi-way.

Bibliografia:

AMIGO, J.M.; SKOV, T.; BRO, R. **ChroMATHography: solving chromatographic issues with mathematical models and intuitive graphics**. *Chemical Reviews*, vol. 110, p. 4582-4605, 2010.

ANDERSSON, C.A.; BRO, R. **The N-way Toolbox for MATLAB. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, vol. 52, p. 1-4, 2000.

BRERETON, R. G. **Chemometrics - Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant**. John Wiley & Sons: New York, 2003.

BRERETON, R. G.. **Applied Chemometrics for Scientists**. John Wiley & Sons: New York, 2007.

BRERETON, R. G. **Chemometrics for Pattern Recognition**. Wiley: New York, 2009

CORREIA, P.R.M.; FERREIRA, M.M.C. **Reconhecimento de padrões por métodos não**

supervisionados: explorando procedimentos quimiométricos para tratamento de dados analíticos. Química Nova, vol.30, n.2, p.481-487, 2007.
DANZER, K.; OTTO, M.; CURRIE, L.A. **Guidelines for calibration in analytical chemistry. Part 2. Multispecies calibration.** Pure & Applied Chemistry, vol. 76, p. 1215-1225, 2004.
MARK H.; WORKMAN, J. **Chemometrics in Spectroscopy.** Elsevier: New York, 2007.
MARTENS, H.; GELADI, P. **Multivariate Calibration.** John Wiley & Sons: New York, 2004.
OLIVIERI, A.; FABER, N.M.; FERRÉ, J.; BOQUÉ, R.; KALIVAS, J.H.; MARK, H. **Guidelines for calibration in analytical chemistry. Part 3 Uncertainty estimation and figures of merit for multivariate calibration.** Pure & Applied Chemistry, vol. 78, p. 633-661, 2006.
SMILDE, A.; BRO, R.; GELADI, P. **Multi-way analysis: applications in the chemical sciences.** Wiley: New York, 2004.

Artigos publicados nos periódicos “Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems” (Elsevier) e “Journal of Chemometrics (Wiley)

PQUI323 –Espectroeletróquímica (4 h semanais; 04 créditos)

Tópicos avançados em espectroeletróquímica, Espectroscopia de refletância no infravermelho, Espectroscopia de refletância no infravermelho modulado eletroquimicamente, Estudos de adsorção de CO em metais (Pt, Pd, Au), Estudos de moléculas intermediárias adsorvidas sobre eletrocatalisadores, SNIFTIRS e SPAIRS.

Bibliografia:

SMITH, B. C. **Fundamentals of Fourier Transform Infrared Spectroscopy.** 2nd Ed. CRC Press. 2011.

BEDEN, B. LAMY, C. **In Espectroeletróquímica, Theory and Practice,** R. J. Gale, New York : Plenum Press. 1988.

BEDEN, B. **Développements récents en spectroscopie de réflexion infrarouge “in situ” à l’interface électrode-solution II – applications.** *Spectra 2000*, n° 95 Vol. 13, 1984.

HEINEN, M., JUSYS, Z., BEHM, R. J. **Ethanol, Acetaldehyde and Acetic Acid Adsorption/Electrooxidation on a Pt Thin Film Electrode under Continuous Electrolyte Flow: An in Situ ATR-FTIRS Flow Cell Study,** *J. Phys. Chem. C* 114, 9850–986, 2010.

COMPTON, R.G. **New Techniques for the Study of Electrodes and Their Reactions,** Elsevier, Oxford. 2006.

YOU, LE-XING, FANG, YI-MIN, GUO, JUN-WEI, ZHANG, LE, CHEN, JIN-SHUI, SUN, JIAN-JUN. **Mechanism of electro-catalytic oxidation of shikimic acid on Cu electrode based on in situ FTIRS and theoretical calculations.** *Electrochimica Acta*, 58, 165-171, 2011.

FARIAS, M. J. S., CAMARA, G.A., TANAKA, A.A. **Electrooxidation of isotope-labeled ethanol: a FTIRS study,** *J. Solid State Electrochem*, 11, 1465-1469, 2007.

PQUI324 – Tópicos Avançados em Físico Química (4 h semanais; 04 créditos)

Ementa e bibliografia em aberto. Será dada de acordo com temas das linhas de pesquisa da área de Físico Química.

PQUI325 - Síntese Orgânica (4 h semanais; 04 créditos)

Interconversão de grupos funcionais; Grupos de Proteção; Reações de Oxidação e Redução; Formação de ligações carbono-carbono via enolato; Formação de ligações carbono-carbono via organometálico; Reações Pericíclicas; Formação de ligações múltiplas carbono-carbono; Análise retró sintética.

Bibliografia:

CAREY, F.A.; SUNDBERG,

R.J. **Advanced Organic Chemistry: Reactions and Synthesis (part B).** 5th ed. Springer. 2007.

- CARRUTHERS, W.; COLDHAM, I. **Modern Methods of Organic Synthesis**, 4th ed., Cambridge University Press. 2004.
- FUHRHOP, J. H.; LI, G. **Organic Synthesis: Concepts and Methods**, 3rd ed. Wiley-VCH. 2003.
- SMITH, M. B. **Organic Synthesis**. 3rd ed. Wavefunctions (Elsevier). 2011.
- SOUZA, M. V. N. **Estudo da Síntese Orgânica Baseado em Substâncias Bioativas**, 1a ed. Editora Átomo. 2010.
- ZWEIFEL G. S.; NANTZ, M. H. **Modern Organic Synthesis: An Introduction**, first edition, W. H. Freeman and Company, 2007.

PQUI326 - Análise Orgânica (4 h semanais; 04 créditos)

Métodos físicos de separação, purificação e caracterização de compostos orgânicos. Espectroscopia de absorção ultravioleta-visível, de infravermelho, de ressonância magnética nuclear (^1H e ^{13}C) e espectrometria de massa.

Bibliografia:

- FIELD, L. D., STERNHELL, S., KALMAN, J. R. **Organic structures from spectra**. New York, Wiley, 2013.
- FORREST, T., RABINE, J. P., ROUILLARD, M. **Organic spectroscopy workbook**. New York, Wiley, 2011.
- GUNTHER, H. **NMR Spectroscopy: Basic Principles, Concepts and Applications in Chemistry**, New York, Wiley-WCH, 2013.
- KEELER, J. **Understanding NMR Spectroscopy**. New York, Wiley, 2010.
- LEE, M. S. **Mass spectrometry handbook**. New Jersey, Wiley, 2012.
- NING, Y. C. **Interpretation of Organic Spectra**. New York, Wiley, 2011.
- PRETSCH, E., BUHMANN P., BADERTSCHER, M. **Structure Determination of Organic Compounds: Tables of Spectral Data**. Springer, 2009.

PQUI327 – Fitoquímica (4 h semanais; 04 créditos)

Métodos químicos de análise de plantas, compostos fenólicos, terpenos, compostos nitrogenados, açúcares e seus derivados, macromoléculas. Técnicas cromatográficas, espectroscópicas e espectrométricas na análise de produtos naturais.

Bibliografia:

- CASTRO, H. G., FERREIRA, F. A., SILVA, D. J. H., MOSQUIM, P. R. **Contribuição ao estudo das Plantas Medicinais: Metabólitos Secundários**, Viçosa, Editora UFV. 2001.
- HAJNOS, M. W., SHERMA, J. **High performance liquid chromatography in phytochemical analysis**. Boca Raton, CRC Press. 2011.
- HARBONE, J. B. **Phytochemical Methods**, Springer. 1998.
- RAMAWAT, K. G., MÉRILLON, J. M. **Natural Products: phytochemistry, botany and metabolism of alkaloids, phenolics and terpenes**. New York, Springer. 2013.
- SHAH, B., SETH, A. K. **Textbook of Pharmacognosy and Phytochemistry**. Delhi, Elsevier India. 2012.

PQUI328 – Tópicos Avançados em Química Orgânica (4 h semanais; 04 créditos)

Ementa e bibliografia em aberto. Será dada de acordo com temas das linhas de pesquisa da área de Química Orgânica.

PQUI329 - Química Ambiental (4 h semanais; 04créditos)

Tópicos avançados em Química dos poluentes em ecossistemas terrestres e aquáticos. Poluição da água. Poluição do solo. Poluição do ar. Tratamento de resíduos. Compostos orgânicos e

Inorgânicos poluentes potencialmente tóxicos. Aspectos analíticos de identificação de espécies químicas tóxicas. Análise e avaliação de impacto ambiental. Legislação ambiental.

Bibliografia:

- ALLOWAY, E. I. **Heavy Metals in Soil: Trace Metals and Metalloids in Soils and their Bioavailability**. 3rd ed. Dordrecht: Springer Science+Business. 2013.
- BAIRD, C.; CANN, M. **Environmental Chemistry**. 5th. ed. New York: Freeman. 2012. 736p.
- BARCELÓ, D. **Emerging Organic Pollutants in Waste Waters and Sludge (The Handbook of Environmental Chemistry / Water Pollution)**. Springer. 2009.282p.
- CLARK, R.B. **Marine Pollution**. Oxford: Clarendon Press, 2001. 248p.
- MANAHAN, S. E. **Environmental Chemistry**. 9th.ed. New York: CRC. 2009. 783p.
- NEILSON, A.H. **Organic Chemicals in the Aquatic Environment: Distribution, Persistence and Toxicity**, CRC Press, New York, EUA, 1994. 448p.
- NEILSON, A. H. **Organic chemical: an environmental perspective**. 1st ed. New York: CRC. 1999. 912p.
- SALOMONS, W. AND FÖSTNER, U. **Metals in the Hydrocycle**. Berlin: Springer-Verlag, 1984. 349p.
- SCHWARZENBACH, R.P.; GSCHWEND, P.M.; IMBODEN, D.M. **Environmental organic chemistry**. 2nd ed. New York: Wiley. 2002. 1328p.
- SILVA, C. M. M. S.; FAY, E. F.; **Agrotóxicos Aspectos Gerais: Agrotóxicos e Ambiente**, Brasília: Embrapa. 2004.

Publicação em periódicos científicos de circulação internacional.

PQUI330 - Métodos de Espectrometria Atômica (6 h semanais; 05 créditos)

Análise de elementos traço por espectrometria atômica. Fenômenos óticos. Espectrometria de absorção atômica com chama, com atomização eletrotérmica, com geração de vapor frio e geração de hidretos. Espectrometria de absorção atômica com fonte contínua. Espectrometria de emissão óptica com fonte de plasma indutivamente acoplado (ICP OES) e Espectrometria de massa com plasma indutivamente acoplado (ICP-MS). Aulas práticas relacionadas às técnicas abordadas.

Bibliografia

- BROEKAERT, J.A.C. **Analytical Atomic Spectrometry with Flames and Plasmas**. 2nd ed. New York: Wiley-VCH, 2005. 432p.
- DEAN, J. R. **Atomic Absorption and Plasma Spectroscopy**. 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, 1997. 228p.
- DULSKI, T.R. **Trace Elemental Analysis of Metals: Methods and Techniques**. 1st ed. New York: CRC. 1999. 592p.
- EBDON, L., EVANS, E.H., FISHER, A.S., HILL, S.J. **An Introduction to Analytical Atomic Spectrometry**. 1st ed. West Sussex: Wiley. 1998. 193p.
- LAJUNEN, L. H. I. **Spectrochemical Analysis by Atomic Absorption and Emission**. 1st ed. Cambridge: Royal Society of Chemistry. 2005. 275p.
- MONTASER, D.W.; GOLIGHTLY, D.W. **Inductively Coupled Plasmas in Analytical Atomic Emission Spectrometry**. 2nd ed., London: VCH Publishers 1992. 1040p.
- VANDECASTEELE, C.; BLOCK, C. E. **Modern Methods for Trace Element Determination**. 1st ed. West Sussex: Wiley. 1997. 344p.
- WELZ, B.; SPERLING M. **Atomic Absorption Spectrometry**. 2nd. ed. London: Wiley-VCH, 1999. 965p.
- WELZ, B.; BECKER-ROSS, H.; FLOREK, S.; HEITMANN, U. **High-Resolution Continuum Source AAS: The Better Way to Do Atomic Absorption Spectrometry**. Weinheim: Wiley-VCH. 2005. 296p.

ZACHARIADIS, G. A. (Editor). **Inductively Coupled Plasma Atomic Emission Spectrometry: A Model Multi-Elemental Technique for Modern Analytical Laboratory**. 1st ed. New York: Nova Science. 2012. 264p.

Publicação em periódicos científicos de circulação internacional.

PQUI331 - Métodos Eletroanalíticos (6 h semanais; 05 créditos)

Aspectos avançados de métodos eletroquímicos de análise; Mecanismos de reação eletroquímica; Potenciometria; Cronoamperometria e Cronocoulometria; Voltametria (voltametria de varredura linear, voltametria cíclica, voltametria de pulso normal, voltametria de pulso diferencial, voltametria de onda quadrada, voltametria de redissolução); Ultramicroeletrodos; Sensores e Biossensores. Atividades experimentais voltadas para a aplicação das principais técnicas eletroanalíticas.

Bibliografia:

BARD, A. J.; FAULKNER, L. R. **Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications**. 2. ed. New York: Wiley. 2001. 864p.

BOCKRIS, J. O'M.; REDDY, A. K. N.; GAMBOA-ALDECO, M. **Modern electrochemistry**. 2. ed. New York: Plenum Press, 2000.

BRETT, A. M. O.; BRETT, C. M. A. **Electroquímica: princípios, métodos e aplicações**. 1. ed. Coimbra: Almedina, 2000.

COOPER, J.; CASS, T. **Biosensors: A Practical Approach**. 2. ed. New York: Oxford University Press, 2004.

GALUS, Z.; **Fundamentals of electrochemical analysis**. 2. ed. New York: Ellis Horwood, 1994.

KISSINGER, P. T.; HENIEMAN, W. R. **Laboratory Techniques in Electroanalytical Chemistry**. 2. ed. New York: Marcel Dekker, 1996.

WANG, J. **Analytical electrochemistry**. 3. ed. New York: Wiley-VCH, 2006.

PQUI332 – Planejamento de Experimentos (4h semanais, 04 créditos)

Comparação entre métodos univariados e métodos multivariados para análise de dados. Planejamentos fatoriais completos e fracionários. Experimentos de triagem de fatores utilizando planejamento fatorial. Planejamentos destinados à obtenção de superfície de resposta. Análise de dados e interpretação dos resultados. Modelagem de misturas.

Bibliografia:

BOX, G.E.P.; HUNTER, W.G.; HUNTER, J.S. **Statistics for Experimenters: Design, Innovation, and Discovery**. 2nd ed. New York: Wiley. 2005. 664p.

BARROS NETO, B.; SCARMÍNIO, I.S.; BRUNS, R.E. **Como fazer experimentos**. 4. ed. Porto Alegre: Bookman. 2010. 414p.

MONTGOMERY, D. C. **Design and analysis of experiments**. 8th ed. New York: John Wiley. 2012. 752p.

PQUI333 – Tópicos Avançados em Química Analítica (4 h semanais; 04 créditos)

Ementa e bibliografia em aberto. Será dada de acordo com temas das linhas de pesquisa da área de Química Analítica.

PQUI334 – Técnicas Modernas de RMN – (6 h semanais; 05 créditos)

Espectroscopia de RMN. O Experimento com um Pulso. Análise de Espectros. Experimentos com Múltiplos Pulsos. Desacoplamento de spins. Técnicas de Transferência de Polarização. Efeito Overhauser Nuclear. RMN Bidimensional. Seminários de Aplicações e Exercícios. Prática: Visão geral de um Espectrômetro de RMN, preparação de amostras, aquisição de dados

e processamento, preparação e calibração do espectrômetro, Sensibilidade/Resolução, Medidas de relaxação, Experimentos 1D, Experimentos NOE, Experimentos 2D.

Bibliografia:

SANDERS, J.K.M. e HUNTER, B.K., **Modern NMR Spectroscopy**. Oxford : Oxford University Press. 1993.

GUNTHER, H. **NMR Spectroscopy: Basic Principles, Concepts and Applications in Chemistry**. Wiley-VCH. 2013.

GIL, V.M.S. e GERALDES, C. F. G. C., **Ressonância Magnética Nuclear**, Fund. Calouste Gulbenkian, Lisboa, 2002.

FRIEBOLIN, H. **Basic One- and Two dimensional NMR Spectroscopy**, New York: VCH. 2005.

LEVITT, M. H., **Spin Dynamics Basics of Nuclear Magnetic Resonance**, John Wiley & Sons Ltda. 2002.

KEELER, J., **Understanding NMR Spectroscopy**. 2nd Ed. John Wiley & Sons Ltda. 2010.

CLARIDGE, T.D.W. **High Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry**. Tetrahedron Organic Chemistry Series, volume 19, Elsevier Science. Amsterdam. 2009.

Artigos de Revisão de Periódicos.

PQUI335 – Métodos de RMN no Estado Sólido (6 h semanais; 05 créditos)

Interações de spin nuclear. Relaxação em RMN. Técnicas de alta resolução em sólidos. Aplicações de RMN em sólidos. Práticas de experimentos de RMN em sólidos.

Bibliografia:

DUER, M. J. **Introduction do solid state NMR spectroscopy**. Blackwell Publishing, 2004.

LEVITT, M. H. **Spin dynamics**. John Wiley & Sons, 2001.

MacKENZIE, K. J. D.; SMITH, M. E. **Multinuclear solid-state NMR of inorganic materials**. Pergamon, 2002.

SLICHTER, C. P. **Principles of Magnetic Resonance**. Springer, 1996.

PQUI336 – Espectrometria de Massas: Fundamentos e Aplicações – (6 h semanais; 05 créditos)

Técnicas de Ionização a baixas pressões: ionização por elétrons (EI); ionização química (CI); FAB “*Fast-Atom-Bombardment*”; MALDI (*Matrix Assisted Laser Desorption Ionization*); Técnicas de Ionização a pressão atmosférica: ESI (*Electron-Spray Ionization*); APPI (*Atmospheric Pressure Photoionization*); APCI (*Atmospheric Pressure chemical ionization*); DESI (*Desorption Electrospray ionization mass spectrometry*); DART (*Direct Analysis in Real Time*); ASAP (*Atmospheric Solids Analysis Probe*); e EASI (*Easy Ambient Sonic-Spray Ionization*); Analisadores de massas: Analisadores magnéticos e eletrostáticos; quadrupolos e multiquadrupolos; “*Ion-Traps*” (ICR, QIT); tempo de vôo (TOF); e Analisadores híbridos (Q-TOF, ICR-QIT); Conceitos Gerais: Transmissão; Análise/Interpretação de espectros: íon/molecular, isótopos, fragmentação, mecanismos, resolução, caracterização de compostos e classes de compostos; outras técnicas: CG-MS, LC-MS, MS/MS/MS; MS_n; CID (*collision-induced dissociation*); Detectores de íons: gaiola de Faraday; Fotomultiplicadores; cela de ICR; etc; Aplicações: Química Forense; Toxicologia Forense; Alimentos; Polímeros; Proteômica; e Petrolômica. Parte experimental: GC-EI-MS; ESI; APCI e APPI; MALDI; ESI para petrolômica

Bibliografia:

GROSS, J. H. e ROEPSTORFF, P. **Mass Spectrometry: A Textbook**. 2a ed., Berlin: Springer. 2011.

HOFFMANN, E. e STROOBANT, V. **Mass Spectrometry: Principles and Applications**, 3a ed.,

Chichester: John Wiley & Sons. 2007.

LEE, T. A. **A Beginner's Guide to Mass Spectral Interpretation**, 1st ed. West Sussex: John Wiley & Sons Ltd. 1998.

WATSON, J. T. SPARKAMAN, O D. **Introduction to Mass Spectrometry: Instrumentation, Applications, and Strategies for Data Interpretation**, Hoboken : John Wiley & Sons, 2008.

PQUI337 – Química de Petróleo (4 h semanais; 04 créditos)

Origem, constituição, características, classificação e a qualidade do Petróleo. Ocorrência dos Hidrocarbonetos e Não-Hidrocarbonetos no petróleo. Correlação entre a Ocorrência dos Constituintes do Petróleo. Determinação Analítica dos Constituintes do Petróleo. Metodologia para a Qualificação do Petróleo. Princípio e Características do Procedimento de Destilação por Pontos de Ebulição Verdadeiros PEV. Qualificação do Petróleo e Propriedades Ligadas ao Transporte e Armazenamento.

Bibliografia:

ANCHEYTA, J. and SPEIGHT, J. G. **Hydroprocessing of Heavy Oils Residua**. CRC Press. 2007.

GARY, J., H; HANDWERK, G., E; KAISER, M. J. **Petroleum Refining**. CRC Press. 2007.

PATTERSON. **Physical Chemistry of Macromolecules**. CRC Press. 2007

PETERS, K. E., MOLDOWAN, J M. **The Biomarker Guide**. Interpreting Molecular Fossils in Petroleum and Ancient Sediments. New Jersey: Prentice Hall, Englewood Cliffs. 2003.

RIAZI, R. M. **Characterization and Properties of Petroleum Fractions**. ASTM. 2005.

SPEIGHT, J. G. **Handbook of petroleum analysis**. New Jersey: John Wiley & Sons. 2001.

SPEIGHT, J. G. **Handbook of Petroleum Product Analysis**. 2002

TISSOT B. P., WELTE, D. H. **Petroleum formation and occurrence**. Berlin Heidelberg New York Tokyo: Springer-Verlag. 1984.

PQUI338 – Biocombustíveis: Aspectos Tecnológicos (4 h semanais; 04 créditos)

Introdução a biocombustíveis. Matriz Energética Brasileira. Biocombustível de material celulósico. Tipos de Biocombustíveis. Biodiesel: Propriedades, Composição Química e Métodos Analíticos de Caracterização. Álcool: Processos de Produção, Controle de Qualidade e Especificação. Eletrobiocombustíveis. Aspectos Tecnológicos e Impacto Ambiental.

Bibliografia:

LEE, J. W. **Advanced Biofuels and Bioproducts**. Editora Springer. 2013.

KNOTHE, G.; VAN, G. J.; RAMOS, L. P. **Manual de Biodiesel**. 1a Ed. Editora Edgard Buchner. 2007.

BOREM, A. **Cana-de açúcar: Bioenergia, Açúcar e Álcool – Tecnologia e Perspectivas**. Ed UFV. 2010.

DANTAS, N. J.; LEITE, G. A.; SILVA, A. L.; BRANDÃO, R. **Bioeletricidade e a Indústria de Álcool e Açúcar**. 1a Ed. Editora Synergia. 2008.

PQUI339 – Métodos Analíticos e Físico-Químicos Aplicados em Petróleo (4 h semanais; 04 créditos)

Petróleo. Caracterização do Petróleo. Tratamento Primário. Métodos Analíticos: ressonância magnética nuclear (RMN), cromatografia gasosa (CG) e líquida de alta performance (HPLC), Infravermelho, Análise Térmica. Espectrometria de Massa. Técnicas Eletroquímicas.

Bibliografia:

SPEIGHT, J. G. **Handbook of Petroleum Analysis**, John Wiley and Sons. 2001.

HSU, C. S. (Editor), **Analytical Advances for Hydrocarbon Research**. Kluwer Academic/Plenum Publisher. 2003.

DAWE, R. A. **Modern Petroleum Technology**, Vol. 2, 6th Edition, John Wiley & Sons, England, 2000.

GIL, M.V., GERALDES, G.F.C. **Ressonância magnética nuclear: fundamentos, métodos e aplicações**. Fundação Calouste. 1987.

SKOOG, A. D.; HOOLLER, J. CROUCH, S. R. **Principles of Instrumental Analysis**. 6th ed. Cengage Learning. 2009.

PQUI340 –Emulsões e Compatibilidade de Petróleo (4 h semanais; 04 créditos)

Formação de emulsões no processamento primário de petróleo, mecanismos de estabilização e desestabilização das emulsões de petróleo do tipo água-em-óleo, métodos para a desestabilização das emulsões de petróleo do tipo água-em-óleo, caracterização de emulsões de petróleo e principais problemas químicos de incompatibilidade de petróleos. Causas de insolubilidade; parâmetros de solubilidade; métodos de seleção de solventes; interações polar; aplicação a macromoléculas de petróleo; modelo de compatibilidade de petróleo; misturas de petróleos e testes de compatibilidade.

Bibliografia:

ANCHEYTA, J, RANA, M.S, TREJO, F. **Chemical Transformation During Hydroprocessing of Asphaltenes**. CRC Press. 2010.

HANSEN. **Solubility Parameters**. CRC Press. 2007.

PILLON, L. **Interfacial Properties of Petroleum Products**. CRC Press. 2007.

SJOBLOM, J. **Encyclopedic Handbook of Emulsion Technology**. Edited by Statoil A/S Trondheim, Norway, 2001.

SPEIGHT, J. G. **Handbook of Petroleum Analysis**. John Wiley and Sons. 2001.

TISSOT B.P., Welte, D.H. **Petroleum formation and occurrence**, Berlin Heidelberg New York Tokyo, Springer-Verlag.

WIEHE, I. A. **Process Chemistry of Petroleum Macromolecules**. CRC press. 2008.

PQUI341- Química Forense (4 h semanais; 04 créditos)

Introdução a Química Forense: conceitos; leis, área de atuação (perito criminal); função do perito; local de crime; apreensões. Documentoscopia. Balística. Drogas de Abuso. Toxicologia Forense. Adulteração de combustível. Técnicas Analíticas e aplicações em Química Forense: Fluorescência de Raios-X; Espectrometria de Massa (LC e CG-MS); Análise Termogravimétrica; Espectroscopia na região do Infravermelho (FTIR, NIR, microespectroscopia); Espectroscopia de emissão atômica (ICP-MS, ICP OES), Quimiometria.

Bibliografia:

BRUNI, A. T.; VELHO, J. A.; OLIVEIRA, M. F. **Fundamentos de Química Forense – Uma análise prática da química que soluciona crimes**. 1a ed. Campinas: Millenium. 2012.

DOREA, L. E.; STUMVOLL, V. P. **Criminalística**. 2a ed. Campinas: Millennium, 2012.

DOREA, L. E. **Local de Crime**. 1a ed. Campinas: Millennium. 2012.

JOBIM, L. F.; COSTA, L. R. S.; SILVA, M. **Identificação Humana - Identificação Médico Legal, Perícias Odontológicas, Identificação Humana pelo DNA**. 2a ed. Campinas: Millennium. 2012.

MENDES L. B. **Documentoscopia**. 3 ed. Campinas: Millennium. 2010.

PASSAGLI, M. **Toxicologia Forense**. 2a ed, ed. Campinas: Millennium. 2009.

TOCCHETTO, D. **Balística Forense: Aspectos técnicos e jurídicos**. 5a ed., Millennium: Campinas, 2009.

PQUI342- Inovação e Empreendedorismo na Química (2 h semanais; 02 créditos)

Formando Empreendedores - Natureza e Importância do Empreendedorismo – Caracterização do empreendedorismo (conceitos de empreendedorismo e sua evolução histórica) – Perfis de empreendedores (definição de empreendedor; identificação de perfis de empreendedor) – Empreendedorismo e desenvolvimento econômico - Espírito Empreendedor e Intraempreendedor – O contexto empreendedor – Processo Empreendedor (etapas do processo de empreender) – Plano de negócios – fonte de crescimento das empresas – Importância das redes (para o desenvolvimento de projetos de inovação em empreendedorismo no contexto nacional e internacional; diferentes tipos de redes de inovação; inovação aberta)

Bibliografia:

ARAÚJO, M. H.; LAGO, R. M.; OLIVEIRA, L. C. A.; CABRAL, P. R. M.; CHENG, L. C.; FILION, L. J. O estímulo ao empreendedorismo nos cursos de química: formando químicos empreendedores. Quím. Nova 2005, 28, S18-S25.

BARON, R. A.; SHANE, S. A. EMPREENDEDORISMO – Uma Visão do Processo. Editora Cengage Learning. 2006. ISBN: 9788522105335.

BERNARDI, L. A. Manual de Empreendedorismo e Gestão - Fundamentos, Estratégias e Dinâmicas. Editora Atlas, 1ª Ed. 2003. ISBN: 9788522433384.

BESSANT, J.; TIDD, J. Innovation and Entrepreneurship. John Wiley & Sons. 2007.

CHIAVENATO, I. Empreendedorismo: dando asas ao espírito empreendedor. Saraiva. 2006.

DORNELAS, J. C. A. Empreendedorismo transformando ideias em negócios. Elsevier. 2011. ISBN: 9788535247589.

MIRSHAWKA, V. Empreender é a Solução. São Paulo: DVS, 2004.

PEABODY, B. Sorte ou talento?: o que realmente faz a diferença para os empreendedores. Elsevier. 2005.

RABI, J. A. Políticas públicas e o empreendedorismo em química no Brasil: o caso da Microbiológica. Quím. Nova 2007, 30, 1420-1428.

SALIM, C. S.; SILVA, N. C. Introdução ao empreendedorismo. Elsevier. 2009. ISBN: 9788535234664.

PQUI343- Propriedade Intelectual e Inovação – Foco em Proteção Patentária (2 h semanais; 02 créditos)

Tecnologia e Inovação. Fontes de financiamento. Relacionamento Universidade-Empresa-Governo. Núcleos de Inovação Tecnológica. Propriedade Industrial - Registro de Marcas e Depósito de Patentes; Patentes de Invenção e Modelos de Utilidade; Processo de patenteamento – procedimentos e prazos. Mecanismos de proteção de invenção e o que pode ser protegido. Desenvolvimento de Produtos; Inserção no Mercado. Agência Brasileira de Inteligência (ABIN); Instituto Nacional de Propriedade Industrial (INPI).

Bibliografia:

Constituição Federal Brasileira de 1988; Lei nº 9.279, de 14.5.1996; Lei nº 10.973, de 2.12.2004; Decreto nº 5.563, de 13.10.2005; Lei nº 11.196, de 21.11.2005; Decreto nº 5.798, de 2006; Lei nº 9.456, de 25.4.1997 e demais normas pertinentes ao tema, vigentes no Brasil no semestre em que a disciplina for ministrada.

PIMENTEL, L. O., Propriedade Intelectual e a Universidade: Aspectos Legais, 1ª ed, Florianópolis: Fundação Boiteaux – Konrad Adenauer

Stifung, 2005, v.1, 182p.

www.inpi.gov.br, Instituto Nacional de Propriedade Industrial (INPI)

<http://www.cgee.org.br>, Centro de Gestão e Estudos Estratégicos (CGEE)

www.mct.gov.br, Ministério da Ciência e Tecnologia (MCT)

www.abpi.org.br, Associação Brasileira da Propriedade Intelectual (IBPI)

www.wipo.int, Organização Mundial de Propriedade Intelectual (OMPI)
www.agricultura.gov.br, Serviço Nacional de Proteção de Cultivares (SNPC) do Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento
www.abes.org.br, Associação Brasileira das Empresas de Software (ABES)
www.abapi.org.br, Associação Brasileira dos Agentes da Propriedade Industrial (ABPI)
MOREIRA, D. A.; QUEIROZ, A. C. S. Inovação organizacional e tecnológica. São Paulo: Thomson Learning, 2007.
TIDD, J.; PAVITT, K.; BESSANT, J. Gestão da inovação. Porto Alegre: Bookman Companhia Editora, 2008.
www.bndes.gov.br, Banco Nacional do Desenvolvimento.
www.sebrae.com.br, Agência de Apoio ao Empreendedor e Pequeno Empresário.
www.cnpq.br, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico.
www.anvisa.gov.br, AGÊNCIA NACIONAL DE VIGILÂNCIA SANITÁRIA.
BARBOSA, D. B. (Ed.). Uma introdução à propriedade intelectual. 2. ed. Rio de Janeiro: Lumen Juris, 2003.
CRUZ, C. H. B.; CHAIMOVICH, H. Brasil. In: UNESCO. Relatório UNESCO sobre ciência 2010 - O atual status da ciência em torno do mundo. Tradução Aires Júnior, Demerval de Sena. Paris: Unesco, 2010.
DRUCKER, P. F. Inovação e espírito empreendedor: prática e princípios. 2. ed. São Paulo: Pioneira, 1987.

DISCIPLINAS SUGERIDAS COMO TÓPICOS

Tópicos Avançados em Química Inorgânica (4 h semanais; 04 créditos)

01– Química das Cerâmicas

Tópicos Avançados em Físico Química (4 h semanais; 04 créditos)

- 01 - Físico-Química de Polímeros**
- 02 - Físico-Química de Materiais**
- 03 - Química Quântica**
- 04 - Química de Superfícies**
- 05 - Termodinâmica Química e Estatística**
- 06 – Tópicos de Corrosão**

Tópicos Avançados em Química Orgânica (4 h semanais; 04 créditos)

- 01 – Estereoquímica**
- 02 – Síntese Orgânica Assimétrica**
- 03 – Métodos Modernos em Síntese Orgânica**
- 04 – Biossíntese de Produtos Naturais**

Tópicos Avançados em Química Analítica (4 h semanais; 04 créditos)

- 01 – Metrologia**
- 02 – Química Aquática**

03 – Química Analítica Ambiental

04- Química dos Solos

05 – Métodos de Separação

09 – Laboratório de Química Analítica Ambiental