



PPGQB

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO
EM QUÍMICA E BIOTECNOLOGIA



EM QUÍMICA E BIOTECNOLOGIA

Ementas das Disciplinas
Ofertadas em **2016.1**



DISCIPLINA: Seminários de Química e Biotecnologia I (Mestrado)

Carga Horária: 30 horas

Créditos: 02

Código: PPGQB007

Tipo: Obrigatória de Caráter Geral

Professoras Responsáveis:

Profa. Dra. Ana Catarina R. Leite e Profa. Dra. Daniela Santos Anunciação

Horário: Segundas-Feiras das 8h30 às 10h30

Local: Sala de Aulas do PPGQB

Ementa: A presente disciplina se justifica pela necessidade de uma maior interação do pós-graduando com linhas de pesquisa distintas, fornecendo-lhes uma visão científica abrangente, estratégias de abordagem, metodologias e avanço das diversas áreas científicas. Os alunos irão analisar criticamente trabalhos científicos que não necessariamente fazem parte da sua área, como também discutir os resultados apresentados com o palestrante. Serão convidados como seminaristas pesquisadores do Brasil e do exterior que ministram conferências das suas pesquisas em Química, Biotecnologia, e áreas relacionadas.

A disciplina será oferecida em todos os semestres e pode ser cursada pelos alunos inscritos no programa de mestrado e doutorado.

Conteúdo Programático Teórico-Prático

O conteúdo será posteriormente determinado pelos palestrantes convidados, representando suas linhas de pesquisa e publicações. De modo geral, os palestrantes ministrarão temas de interesse nas áreas de Química e Biotecnologia, contemplando as principais linhas de pesquisa de vanguarda na ciência nacional e internacional.



METODOLOGIAS DE AVALIAÇÃO

A avaliação final será feita pelos professores responsáveis levando em consideração os critérios:

- Frequência (mínima de 75%)

Não será atribuída falta ao aluno que estiver participando de congresso no dia da apresentação do seminário. Neste caso o aluno deverá apresentar ao professor o certificado de participação no congresso.

BIBLIOGRAFIA

As mais diversas citadas e apresentadas pelos ministrantes, entre elas, artigos de acesso em base de dados científicos (Web of Science, Science direct; Scopus, SciFinder, PubMed; etc).



DISCIPLINA: Seminários de Química e Biotecnologia II (Mestrado)

Pré-Requisito:

Ter cursado com aprovação Seminários de Química e Biotecnologia I

Carga Horária: 30 horas

Créditos: 02

Tipo: Obrigatória de Caráter Geral

Código: PPGQB008

Professoras Responsáveis:

Profa. Dra. Ana Catarina R. Leite e Profa. Dra. Daniela Santos Anuniação

Horário: Segundas-Feiras das 8h30 às 10h30

Local: Sala de Aulas do PPGQB

Ementa: A presente disciplina se justifica pela necessidade de uma maior interação do pós-graduando com linhas de pesquisa distintas, fornecendo-lhes uma visão científica abrangente, estratégias de abordagem, metodologias e avanço das diversas áreas científicas. Os alunos irão analisar criticamente trabalhos científicos que não necessariamente fazem parte da sua área, como também discutir os resultados apresentados com o palestrante. Serão convidados como seminaristas pesquisadores do Brasil e do exterior que ministram conferências das suas pesquisas em Química, Biotecnologia, e áreas relacionadas.

A disciplina será oferecida em todos os semestres e pode ser cursada pelos alunos inscritos no programa de mestrado e doutorado.

Conteúdo Programático Teórico-Prático

O conteúdo será posteriormente determinado pelos palestrantes convidados, representando suas linhas de pesquisa e publicações. De modo geral, os palestrantes ministrarão temas de interesse nas áreas de Química e



Biotecnologia, contemplando as principais linhas de pesquisa de vanguarda na ciência nacional e internacional.

METODOLOGIAS DE AVALIAÇÃO

A avaliação final será feita pelos professores responsáveis levando em consideração os critérios:

- Frequência (mínima de 75%)
- O mestrando deverá apresentar um seminário com foco em sua área de pesquisa e receberá o devido conceito em função de sua apresentação.

Não será atribuída falta ao aluno que estiver participando de congresso no dia da apresentação do seminário. Neste caso o aluno deverá apresentar ao professor o certificado de participação no congresso.

BIBLIOGRAFIA

As mais diversas citadas e apresentadas pelos ministrantes, entre elas, artigos de acesso em base de dados científicos (Web of Science, Science direct; Scopus, SciFinder, PubMed; etc).



DISCIPLINA: Seminários de Química e Biotecnologia III (Doutorado)

Carga Horária: 30 horas

Créditos: 02

Código: PPGQB009

Tipo: Obrigatória de Caráter Geral

Professoras Responsáveis:

Profa. Dra. Ana Catarina R. Leite e Profa. Dra. Daniela Santos Anunciação

Horário: Segundas-Feiras das 8h30 às 10h30

Local: Sala de Aulas do PPGQB

Ementa: A presente disciplina se justifica pela necessidade de uma maior interação do pós-graduando com linhas de pesquisa distintas, fornecendo-lhes uma visão científica abrangente, estratégias de abordagem, metodologias e avanço das diversas áreas científicas. Os alunos irão analisar criticamente trabalhos científicos que não necessariamente fazem parte da sua área, como também discutir os resultados apresentados com o palestrante. Serão convidados como seminaristas pesquisadores do Brasil e do exterior que ministram conferências das suas pesquisas em Química, Biotecnologia, e áreas relacionadas.

A disciplina será oferecida em todos os semestres e pode ser cursada pelos alunos inscritos no programa de mestrado e doutorado.

Conteúdo Programático Teórico-Prático

O conteúdo será posteriormente determinado pelos palestrantes convidados, representando suas linhas de pesquisa e publicações. De modo geral, os palestrantes ministrarão temas de interesse nas áreas de Química e Biotecnologia, contemplando as principais linhas de pesquisa de vanguarda na ciência nacional e internacional.



METODOLOGIAS DE AVALIAÇÃO

A avaliação final será feita pelos professores responsáveis levando em consideração os critérios:

- Frequência (mínima de 75%)

Não será atribuída falta ao aluno que estiver participando de congresso no dia da apresentação do seminário. Neste caso o aluno deverá apresentar ao professor o certificado de participação no congresso.

BIBLIOGRAFIA

As mais diversas citadas e apresentadas pelos ministrantes, entre elas, artigos de acesso em base de dados científicos (Web of Science, Science direct; Scopus, SciFinder, PubMed; etc).



DISCIPLINA: Seminários de Química e Biotecnologia IV (Doutorado)

Pré-Requisito:

Ter cursado com aprovação Seminários de Química e Biotecnologia III

Carga Horária: 30 horas

Créditos: 02

Código: PPGQB010

Tipo: Obrigatória de Caráter Geral

Professoras Responsáveis:

Profa. Dra. Ana Catarina R. Leite e Profa. Dra. Daniela Santos Anunciação

Horário: Segundas-Feiras das 8h30 às 10h30

Local: Sala de Aulas do PPGQB

Ementa: A presente disciplina se justifica pela necessidade de uma maior interação do pós-graduando com linhas de pesquisa distintas, fornecendo-lhes uma visão científica abrangente, estratégias de abordagem, metodologias e avanço das diversas áreas científicas. Os alunos irão analisar criticamente trabalhos científicos que não necessariamente fazem parte da sua área, como também discutir os resultados apresentados com o palestrante. Serão convidados como seminaristas pesquisadores do Brasil e do exterior que ministram conferências das suas pesquisas em Química, Biotecnologia, e áreas relacionadas.

A disciplina será oferecida em todos os semestres e pode ser cursada pelos alunos inscritos no programa de mestrado e doutorado.

Conteúdo Programático Teórico-Prático

O conteúdo será posteriormente determinado pelos palestrantes convidados, representando suas linhas de pesquisa e publicações. De modo geral, os palestrantes ministrarão temas de interesse nas áreas de Química e Biotecnologia, contemplando as principais linhas de pesquisa de vanguarda na ciência nacional e internacional.



METODOLOGIAS DE AVALIAÇÃO

A avaliação final será feita pelos professores responsáveis levando em consideração os critérios:

- Frequência (mínima de 75%)
- O doutorando deverá apresentar um seminário com foco em sua área de pesquisa e receberá o devido conceito em função de sua apresentação.

Não será atribuída falta ao aluno que estiver participando de congresso no dia da apresentação do seminário. Neste caso o aluno deverá apresentar ao professor o certificado de participação no congresso.

BIBLIOGRAFIA

As mais diversas citadas e apresentadas pelos ministrantes, entre elas, artigos de acesso em base de dados científicos (Web of Science, Science direct; Scopus, SciFinder, PubMed; etc).



DISCIPLINA: PROTEÍNAS ANTIMICROBIANAS

Carga Horária: 30 horas

Nº de Créditos: 02

Código: PPGQB048

Tipo: Eletiva

Prof. Dr. Francis Soares Gomes

Horário: Quintas-Feiras das 10h às 12h

Local: Sala de Aulas do PPGQB

OBJETIVOS: Contextualizar o aluno na problemática mundial dos danos econômicos e à saúde causados por bactérias e fungos. Oferecer conhecimento aprofundado do potencial biotecnológico das proteínas como agentes antimicrobianos. Proporcionar o conhecimento dos mecanismos envolvidos na ação antimicrobiana das diversas classes de proteínas. Apresentar metodologias de avaliação de atividade antimicrobiana de proteínas.

PROGRAMA:

Proteínas: estrutura e funções

Proteínas: técnicas de extração e purificação

Proteínas: técnicas de caracterização

Lectinas: detecção, estrutura, funções e atividades biológicas

Inibidores de proteases: detecção, estrutura, funções e atividades biológicas

Outras classes de proteínas antimicrobianas.

Mecanismos de ação de proteínas antimicrobianas.

Perspectivas biotecnológicas.

BIBLIOGRAFIA:

- ✓ Artigos no periódicos capes, www.sciencedirect.com.br, pubmed.



- ✓ Villa, Tomás G., and Patricia Veiga-Cresco. Antimicrobial Compounds: Current Strategies and New Alternatives. Springer Science & Business Media, 2013.
- ✓ Buhner, Stephen Harrod. Herbal Antibiotics: natural alternatives for treating drug-resistant bacteria. Storey Publishing, 2012.
- ✓ Bobone, Sara. Peptide and Protein Interaction with Membrane Systems: Application to Antimicrobial Therapy and Protein Drug Delivery. Springer, 2014.



Disciplina: Química Inorgânica Avançada

Carga horária: 60 horas

Nº de Créditos: 04

Código: PPGQB003

Tipo: Obrigatória de Formação Básica

Prof. Dr.: Mario Roberto Meneghetti

Horário: Segundas e Quartas das 16h às 18h

Local: Sala de Aulas do PPGQB

Ementa: Teorias de Ligação de compostos dos blocos s e p. Química dos Elementos de Transição. Elementos de Simetria e suas influências nas propriedades das moléculas Compostos de Coordenação. Termodinâmica de Formação de Complexos. Ligação nos Complexos de Metais de Transição. Espectros Eletrônicos e Magnetismo dos Complexos dos Elementos de Transição. Mecanismos de Reações inorgânicas.

Objetivos:

Compreensão da ligação química e das geometrias dos compostos envolvendo metais de transição, bem como da estabilidade e reatividade dos mesmos. Explorar as aplicações de tais compostos em catálise a sua importância na química bioinorgânica. A disciplina pretende fornecer subsídios ao estudante para classificar um composto de coordenação como tal. Ao final do semestre o aluno deverá entender a sua formação e os fatores que influenciam a sua estabilidade, explicar a ligação química neste tipo de compostos, dentro de cada teoria. O aluno também deverá relacionar as vantagens e limitações de cada teoria e aplicar a teoria adequada a cada caso de interesse. O objetivo final é transpor estes conhecimentos para a compreensão e previsão de reações inorgânicas como subsídio principal para a aplicação em Química Organometálica e Catálise.

Metodologia: A disciplina consistirá de aulas teóricas, onde serão apresentados os aspectos relevantes para o desenvolvimento do aluno em cada tópico. Estes serão acompanhados de exercícios de fixação e de duas avaliações escritas, bem como seminários. As aulas serão expositivas com auxílio de consulta em livros e uso de data show.

Avaliação: O desempenho do aluno será avaliado na forma de duas avaliações bimestrais: A1 e A2. Em cada avaliação bimestral o aluno terá uma prova teórica: (P1) ou (P2), Pós-testes envolvendo cada tópico da disciplina (PT_n) e um seminário (S) por bimestre. As provas terão peso 3, o seminário terá peso 2 e a média dos pós testes terão peso 1. A nota de cada bimestre será calculada da seguinte maneira:

$$A_x = \frac{3P_x + 2S + 1 \sum_1^n PT_n}{6}$$



A nota final do aluno será a média aritmética, apurada até centésimos, das notas das 02 (duas) Avaliações Bimestrais:

$$NF = \frac{A1 + A2}{2}$$

Será considerado aprovado o aluno que obtiver $NF \geq 7,00$.

Será considerado automaticamente reprovado o aluno que obtiver $NF \leq 5,00$.

O aluno que obtiver $NF \leq 7,00 \geq 5,00$ terá direito a uma prova final (PF), que versará sobre todo o conteúdo da disciplina. Neste caso será considerado aprovado o aluno que obtiver média final (MF) $\geq 5,5$, sendo determinada da seguinte maneira:

$$MF = \frac{6xNF + 4xPF}{10}$$

Conteúdo Programático:

1. Teoria dos Orbitais Moleculares

- Diagramas de orbitais moleculares de moléculas diatômicas
- Ligações σ e π
- Magnetismo
- Moléculas poliatômicas

2. Teoria de Ligação de Valência

- Hibridização de orbitais atômicos
- Ligações σ e π

3. Sólidos

- Ligação metálica e sólidos metálicos
 - a) Teoria do elétron livre
 - b) Teoria de bandas
 - c) Estrutura cristalina
- Sólidos iônicos
 - a) Formação da ligação iônica
 - b) Fórmula eletrônica e íon-fórmula
 - c) Propriedades dos compostos iônicos
 - d) Estrutura cristalina
 - e) O ciclo de Born-Haber

4. Noções de Simetria

- Elementos de Simetria
- Classificação de Moléculas de acordo com seus elementos de simetria
- Influência dos elementos de simetria nas propriedades das moléculas



- Influência dos elementos de simetria na estrutura eletrônica das moléculas

5. Compostos de Coordenação: Conceitos Básicos

- Propriedades físicas e químicas dos elementos do bloco d
- Compostos de coordenação
- O trabalho de Werner
- Ligantes
- Geometrias de complexos
- Quelatos
- Notação e nomenclatura de complexos

6. Teorias de Ligação Química

- Formas dos orbitais d
- Número de oxidação e configuração eletrônica dos íons
- Contagem de elétrons
- Número de coordenação
- Teoria da Ligação de Valência (TLV)
 - a) Hibridização
 - b) Magnetismo
- Teoria do Campo Cristalino (TCC)
 - a) Desdobramento do campo cristalino
 - b) Energia de Estabilização do Campo Cristalino
 - c) Fatores que influenciam no valor de Δ
 - d) Série espectroquímica
 - e) A cor dos complexos. Espectroscopia
 - f) Efeitos do desdobramento do campo cristalino
 - g) Distorção tetragonal em complexos octaédricos
- Teoria do Orbital Molecular (TOM)
 - a) Ligação σ e π
 - b) Retrodoação e a série espectroquímica
- Noções de Espectroscopia aplicada ao estudo de complexos
 - a) Espectroscopia eletrônica
 - b) Espectroscopia de infra-vermelho

7. Reações de Complexos

- Constante de estabilidade de complexos
- Influência do ligante e do íon metálico na estabilidade dos complexos
- Reações de substituição em compostos de coordenação octaédricos
- Reações em complexos quadrados: o efeito *trans*



- Mecanismo de transferência de elétrons entre compostos de coordenação

8. Compostos Organometálicos

- Estrutura e classificação
- Ligação metal-carbono
- Regra dos 18 elétrons
- Analogia Isolobular
- Ligantes típicos (CO, CN, MeCN, NO, PR₃, hidrocarbonetos de cadeia aberta, polienos cíclicos)

9. Aplicações à Catálise

- Etapas catalíticas elementares: coordenação, adição oxidativa, migração e ataque nucleofílico à ligantes
- Princípio da catálise e cinética de reações catalíticas
- Alguns ciclos catalíticos e processos industriais importantes

Bibliografia:

Principais: HUHEEY, J. E. **Inorganic Chemistry**, Harper & Row Publishers., 4 ed., 1993.

COTTON, F. A.; WILKINSON, G. **Publishers**, New York, 1972. **Advanced Inorganic Chemistry**, 3ª Ed., Interscience, 2006.

IAN FLEMING, **Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions**, Wiley, 2010.

KAZUO NAKAMOTO, **Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds**, John Wiley, 4th Ed, 1986.

BASOLO, F., PEARSON, R., **Mechanisms of Inorganic Reactions**, John Wiley, 1967.

Auxiliares:

SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W. **Química Inorgânica**, Editora Bookman. 2003.

CATHERINE E. HOUSECROFT AND ALAN G. SHARPE, **Inorganic Chemistry**, Prentice Hall, 4 ed. 2012.

JAIRTON DUPONT, **Química Organometálica Elementos do Bloco D**, 2005.

BARROS, H. L. C. **Química Inorgânica – Uma Introdução**. 1992.

LEE, J. D. **Química Inorgânica**, Editora Edgard Blucher Ltda. 2000. MAHAN, B. H. **Química um Curso Universitário**, Editora Edgard Blucher Ltda. 1999.

Artigos de periódicos científicos.



Disciplina: Ecologia Química dos Metabólitos Secundários Envolvidos nas Interações entre Plantas e Insetos

Carga Horária: 60 horas

Nº de Créditos: 4

Código: PPGQB027

Tipo: Eletiva

Profª. Drª.: Ruth Rufino do Nascimento

Horário: Quinta-feira das 08h às 10h e na mesma quinta-feira das 14h às 16h

Local: Sala de Aulas do PPGQB

Ementa: Os modos de comunicação e suas características. Os infoquímicos. A química dos feromônios: volatilidade e estereoquímica. Biogênese dos feromônios. Técnicas empregadas na extração e caracterização dos semioquímicos envolvidos nas interações inter- e intra-específicas.

Objetivo: Conhecer os semioquímicos envolvidos nas interações entre plantas e insetos.

Conteúdo

01- Os semioquímicos: alomônios, cairomônios, sinomônios e feromônios de himenópteros, lepidópteros, coleópteros e dípteros.

02- A Química dos feromônios de himenópteros, lepidópteros, coleópteros e dípteros: volatilidade e estereoquímica.

03- Biogênese dos feromônios: biosíntese total (mariposas), seqüestro e síntese “de novo” (dípteros e borboletas).

04- Técnicas empregadas na extração e caracterização dos semioquímicos envolvidos nas interações inter- e intra-específicas.



Bibliografia

1. Agosta, W. C. (1992). Chemical Communication-the language of pheromones. Scientific American Library, New York, 178 pp.
2. Gullan, P.J. & Cranston, P.S. 1994. The insects: na outline of entomology. Chapman & Hall, London, 491p.
3. Harborne, J. B. 1988. Introduction to ecological biochemistry. Academic Press. London.
4. Howse, P; Stevens, I. & Jones, O. Insect Pheromones and their use in Pest Management. P. Howse, I. Stevens & O. Jones (Eds.), Chapman & Hall, London, 369 pp.
5. Morgan, E. D. (2004). Biosynthesis in insects. Royal Society of Chemistry, London, 199 pp.



Disciplina: Química Orgânica Avançada I

Carga Horária: 60 horas

Nº de Créditos: 04

Código: PPGQB001

Tipo: Obrigatória de Formação Básica

Profª. Drª.: Marília Oliveira Fonseca Goulart

Horário: Terças e Quintas das 16h às 18h

Local: Sala de Aulas do PPGQB

EMENTA: Tópicos Fundamentais em teoria de ligação, estereoquímica, análise conformacional e aromaticidade. Intermediários principais e tipos reacionais básicos, incluindo efeitos dos substituintes e estereoquímicos dinâmica.

OBJETIVOS: Visa fornecer aos estudantes de Pós-Graduação a base qualitativa e quantitativa para uma compreensão profunda dos aspectos estruturais dos compostos orgânicos e mecanísticos das reações orgânicas.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO:

- 1- Ligação Química e Estrutura
 - 1-1- Tautomerismo, Hiperconjugação e Aromaticidade
- 2- Ácidos e Bases
- 3- Estereoquímica e Análise Conformacional
- 4- Estudo e Descrição de Mecanismos Reacionais
- 5- Intermediários reativos
 - 5-1- Carbânions
 - 5-2- Carbocátions
 - 5-3- Radicais Livres
 - 5-4- Carbenos

- 6- Reações Pericíclicas

BIBLIOGRAFIA

- F. A . Carey & R. J. Sundberg Advanced Organic Chemistry, Partes A e B, 3. edição, Plenum Press, Nova Iorque, 1990; 4a. edição, 2002.
- J. B. Hendrickson, D. J. Cram, G. S. Hammond Organic Chemistry, 3. ed., McGraw-Hill-Hill, Nova Iorque, 1970.
- J. March Advanced Organic Chemistry, 4. ed., Wiley, Nova Iorque, 1992.
- I. Fleming Frontier Orbitals and Organic Chemistry, Marcel Dekker, Nova Iorque, 1974.



Disciplina: Quimiometria

Carga Horária: 30 horas

Créditos: 02

Tipo: Eletiva

Código: PPGQB055

Prof. Dr. Wander Gustavo Botero

Horário: Terças-Feiras das 10h às 12h

Local: Sala de Aulas do PPGQB

Ementa: Introdução. Características gerais da Quimiometria. Histórico da Quimiometria. Planejamento experimental e otimização de experimentos. Softwares específicos em Quimiometria. Análise exploratória. Análise de componentes principais (PCA). Análise hierárquica de agrupamentos (HCA). Uso de softwares para HCA e PCA. Estudos de casos. Aplicação em sistemas reais.

Objetivos: Fornecer ao aluno subsídios para o bom entendimento dos conceitos fundamentais em Quimiometria, conhecimentos em softwares específicos, estudos de casos com trabalhos científicos publicados em periódicos nacionais e internacionais na área, desenvolvimento e interpretação de gráficos de HCA e PCA. E por fim, espera-se que o aluno esteja apto a aplicar os conceitos estudados no desenvolvimento de seu trabalho de pesquisa.

Conteúdo Programático:

Descrição Aulas

1 Introdução: Breve introdução da quimiometria, a importância do uso de análise multivariada em diversas áreas, apresentação de bibliografia, metodologia de trabalho e softwares específicos.

2 Histórico: Breve histórico da quimiometria em nível nacional e internacional, utilizando periódicos específicos na área.

3 Planejamento experimental: Planejamento fatorial, modelos empíricos, superfícies de resposta, exemplos em softwares específicos.



4 Análise de componentes principais: Principais conceitos de PCA, exemplos práticos, uso de softwares.

5 Análise Hierárquica de agrupamentos: Principais conceitos de HCA, exemplos práticos, uso de softwares.

6 Uso de softwares HCA e PCA 047 Estudos de casos: seminários abordando uso de técnicas quimiométricas em diversas áreas

8 Aplicações em sistemas reais: Apresentação de projetos de uso das técnicas estudadas em

Metodologia de ensino: Exposições orais, interpretação e discussão de trabalhos publicados em periódicos da área, pesquisa bibliográfica relacionada ao tema da disciplina, aplicação da referida disciplina em sistemas reais.

Recursos Didáticos: Retroprojeter, Projetor Multimídia, Recursos computacionais e softwares específicos em Quimiometria.

Avaliação: Análise Crítica de Trabalhos, Projeto e/ou Trabalho a ser Desenvolvidas e Apresentadas, Listas de Exercícios e atividades práticas com softwares específicos.

Referências Bibliográficas:

1. Neto, B. B.; Scarminio, I. S.; Bruns, R. E. Como fazer experimentos. Editora Bookman, 2009.
2. Martens, H.; Naes, T.; Multivariate Calibration. Chichester: John Wiley & Sons, 1992.
3. Brereton, R. G. "Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant", John Wiley & Sons, Chichester-UK, 2003.
4. Massart, D. L.; Vandeginste, B.G.M.; Deming, S. N.; Michotte, Y.; Kaufman, L. "Chemometrics: A Textbook", Elsevier Science B. V., Amsterdam, 2003.
5. Beebe, K. R.; Pell, R. J.; Seasholtz, M. B. "Chemometrics—A Practical Guide", John Wiley & Sons: New York, 1998.
6. Sharaf, M. A.; Illman, D. L.; Kowalski, B. R. Chemometrics. Wiley, 1986



7. Barros Neto, I. S.; Scarmínio, R. E. B. Planejamento e otimização de experimentos. Campinas: Unicamp, 1995.
8. Analytical Chemistry. New York: Wiley-VCH.
9. Analytica Chimica Acta. New York: Elsevier.
10. Chemom. Intell. Lab.Sys. New York: Elsevier.
11. Journal of Chemical Education. New York: Wiley.



Disciplina: Métodos Espectroscópicos de Análise Orgânica

Carga Horária: 60 horas

Nº de Créditos: 04

Código: PPGQB043

Tipo: Eletiva

Profa. Dra. Lúcia Maria Conserva

Horário: Terças e Sextas das 08h às 10h

Local: Sala de Aulas do PPGQB

EMENTA: Conceituação básica indispensável ao estudo sobre os principais métodos físicos de caracterização de compostos orgânicos: espectroscopia de absorção no infravermelho (IV), ultravioleta (UV-VIS), ressonância magnética nuclear de hidrogênio (RMN ^1H) e espectrometria de massas (EM).

OBJETIVO GERAL: Conhecer os conceitos teóricos dos principais métodos físicos (IV, UV, RMN ^1H e EM) e treinar como utilizá-los para a solução de problemas de identificação e/ou determinação estrutural.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS:

- Conhecer o funcionamento de cada técnica e de seu respectivo equipamento. Identificar e diferenciar as funções orgânicas. Integrar as informações obtidas nas diferentes técnicas para a identificação de compostos orgânicos.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

Introdução geral; importância e aplicações.

Módulo I: Espectroscopia na Região do Infravermelho (IV)

Teoria e base física do fenômeno; equipamento IV-FT e manuseio de amostra; modos normais de vibração de moléculas poliatômicas; frequências características de grupos funcionais (ligações simples, duplas, triplas, aromáticos, compostos carbonílicos, compostos halogenados, etc); manuseio de tabelas de correlação e análise de espectros.

Módulo II: Espectroscopia na Região do Ultravioleta/Visível (UV/VIS)

O Espectro visível e o espectro eletromagnético; base física do fenômeno; o espectro UV/visível e suas características; leis de absorção da luz e suas limitações; instrumentação e manuseio de amostra para análise; transições eletrônicas e a influência de solventes; desdobramento de termos espectroscópicos (cromóforo, auxocromo, efeitos batocrômico, hipsocrômico, hiperocrômico e hipocrômico); principais tipos de cromóforos; correlações espectrais: efeitos de substituintes (regras empíricas para olefinas, sistemas de conjugação estendida, compostos carbonílicos e aromáticos; compostos heteroaromáticos; aspectos estereoquímicos; análise de espectros.

Módulo III: Ressonância Magnética Nuclear de Hidrogênio (RMN ^1H)



Definição, aplicação e evolução histórica da RMN e da instrumentação; princípios básicos de RMN e o fenômeno da RMN; lei de distribuição de Boltzmann e mecanismos de relaxamento; manuseio de amostras e solventes em RMN; deslocamento químico e

fatores que influencia; integração; acoplamento spin-spin e equivalência química, magnética e acidental; constantes de acoplamento; troca química inter- e intramoleculares e mudanças conformacionais; correlação de dados e análise de espectros de primeira e de segunda ordem. Assuntos complementares: efeito de solventes em RMN, reagentes de deslocamento, NOE e interação do hidrogênio com outros núcleos.

Módulo IV: Espectrometria de Massas (EM) e Aplicação Conjunta das Técnicas

Técnica e Instrumentação; detecção de íons: resolução, transmissão e modos de varredura; principais técnicas de ionização [ionização por elétrons (IE), ionização química (CI), Fast-Atom-Bombardment (FAB), Matrix-Assisted Laser Desorption Ionization (MALDI), Electron-Spray Ionization (ESI)]; isótopos, íons positivos, negativos, moleculares e reações íons-molécula; análise aritmética e mecanística do espectro: fragmentação e rearranjos característicos de compostos orgânicos; análise e interpretação de espectros. Assuntos complementares: GC/MS, LC/MS, MS/MS, MS/MS/MS, etc.

METODOLOGIA DE ENSINO E RECURSOS DIDÁTICOS: A disciplina será desenvolvida utilizando-se exposição oral com auxílio do quadro de escrever, retroprojeter, projetor de slides, software educacional, resolução de espectros e exercício.

BIBLIOGRAFIA

1. Silverstein, R.M.; Webster, F.X.; Kiemle, D.J., *Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos*, 6ª e 7ª Eds., Editora LTC, Rio de Janeiro, 2000 e 2007.
2. Pavia, D.L.; Lampman, G.M.; Kriz, G.S., *Introduction to Spectroscopy*, Brooks/Cole-Thomson Learning, 3th Ed., 2001.
3. Barbosa, L.C.A., *Espectroscopia no Infravermelho na Caracterização de Compostos Orgânicos*, Ed. UFV, Viçosa, 2007.
4. McLafferty, F.W.; Turecek, F. *Interpretation to Mass Spectrometry* - University Science Books, California, 2001.
5. Ashcroft, A.E., *Ionization Methods in Organic Mass Spectrometry* – The Royal Society of Chemistry, 1997.
7. Gil, V.M.S., Geraldés, C.F.G.C. - *Ressonância Magnética Nuclear: Fundamentos, Métodos e Aplicações*, 2a. ed. Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 2002.
8. Williams, D.H., Fleming, I., *Spectroscopic Methods in Organic Chemistry*, 5th ed., McGraw-Hill, London, 1995.

Bibliografia Complementar: Textos e problemas de outras fontes, incluindo artigos de periódicos e uso de programas computacionais.



Disciplina: Química Analítica Avançada I

Carga Horária: 60 horas

Nº de Créditos: 04

Código: PPGQB004

Tipo: Obrigatória de Formação Básica

Profa. Dra. Daniela S. Anunciação e **Prof. Dr.** Josué Carinhanha C. Santos

Horário: Segundas e Quartas das 14h às 16h

Local: Sala de Aulas do PPGQB

Ementa:

Conceitos sobre os métodos de análise com ênfase em técnicas espectrofotométrica, fluorimetria, luminescência e quimiluminescência. Detalhar os aspectos quantitativos envolvendo as técnicas supracitadas, destacando aplicações e limitações. Desenvolver senso crítico quanto à escolha da técnica analítica mais adequada para realização de análise, aberto de amostras por via úmida, tratamento estatístico de resultados, linearidade e curvas polinomiais, comparação e tratamento estatístico dos resultados obtidos, etc. Busca-se também desenvolvimento de trabalhos experimentais utilizando inicialmente a espectrofotometria como técnica analítica. Abordagem teórica e prática de técnicas de análise em fluxo como **FIA**, **SIA**, **BIA**, etc utilizando detecção espectrofotométrica e quando possível, quimiluminescente.

Objetivos:

Desenvolver habilidade teórico/prático quanto aos métodos ópticos de análise, princípios de funcionamento dos métodos, escolha de metodologias, técnicas de abertura de amostras para análise, resolução de problemas de interferentes, metodologias envolvendo adição de padrão convencional, noções e aplicações de análises químicas por injeção em fluxo, análise estatística de resultados e testes de linearidade.

Conteúdo Programático:

1. Métodos ópticos de análise.
2. Classificação dos métodos ópticos de análise.
 - 2.1 Métodos envolvendo absorção de fótons.
 - 2.2 Métodos envolvendo emissão de fótons.
 - 2.3 Métodos envolvendo o espalhamento de fótons.
 - 2.4 Métodos envolvendo a reflexão de fótons.
3. Componentes físicos e eletrônicos.
4. Fontes de Excitação, sistemas de detecção e aquisição de dados.



5. Equipamentos comercialmente disponíveis.
6. Técnicas de Abertura de amostras.
7. Análise de constituintes em nível de traços.
 - 7.1. Técnicas de separação
 - 7.2. Metodologias de pré-concentração
8. Tratamento estatístico de resultados – Métodos da curva de referência, Testes de linearidade e curvas polinomiais, adição de padrões, limites de detecção e quantificação, validação de metodologias analíticas e métodos oficiais de análises.
9. Tendências e perspectivas das técnicas ópticas de análises.

Bibliografia:

1. T. R. Crompton, **Determination of Anions: A guide for the Analytical Chemistry,**
2. T. Nowicka-jankowska; K. gorczynska; A. Michalik and E. Wietska, **Analytical Visible and Ultraviolet Spectrometry,**
3. Jose A. C. Broekaert, **Analytical Atomic Spectrometry With Flames and Plasmas,**
4. P. C. Meier and R. E. Zund, **Statistical Methods in Analytical Chemistry,**
5. W. J. Younden and H. Steiner, **Statistical Manual of the Association of Official Analytical Chemists,**
6. A. M. Garcia-Campana; W. R. G. Baeyens and A. Garcia-Campana, **Chemiluminescence in Analytical Chemistry,**
7. L. Sommer, **Analytical Absorption Spectrophotometry in the Visible and Ultraviolet,**
8. Z. Marckzenko, **Separation and Spectrophotometric Determination of Elements,**
9. F. D. Snell, **Photometric and Fluorometric Methods of Analysis-Nonmetals.**



Disciplina: Empreendedorismo e Inovação em Setores Tecnológicos

Carga Horária: 60 horas

Créditos: 04

Tipo: Obrigatória de Formação Básica

Código: PPGQB005

Prof. Dr. Josealdo Tonholo

Horário: Terças-Feiras das 09h à 18h (com 1h de intervalo)

Local: Auditório do Núcleo de Pesquisa Multidisciplinar (Severinão)

EMENTA: Estímulo ao empreendedorismo inovador, com ênfase na geração e gestão de negócios inovadores nas áreas tecnológicas,

PÚBLICO-ALVO: Estudantes de Pós-Graduação em Química, Biotecnologia, Materiais, Economia e áreas afins

OBJETIVOS: A disciplina é destinada a desenvolver a habilidade empreendedora de alunos de pós-graduação em Química, Materiais, Economia e áreas afins, com estudos de casos e dinâmicas que estimulem a estruturação de atividades empreendedoras e promoção da inovação de base tecnológica. São tratados temas relacionados à Propriedade Intelectual e Sistemas de Inovação.

VAGAS: 30 vagas para alunos regulares e 10 vagas para alunos especiais

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO:

- Análise de potencialidades/oportunidades no setor Químico/Tecnologia
- Dinâmica “Ilha das Flores”
- Características Empreendedoras
- Ciclo de vida de uma empresa
- O paradigma do Ensino do Empreendedorismo
- A Universidade e o Empreendedorismo
- A geração de negócios inovadores
- O processo do novo negócio
- O ciclo de estímulo ao negócio inovador
- O ensino do empreendedorismo – o Por Quê em 15 motivos
- Causas para empreender
- Quem são os empreendedores?
- A teoria visionária
- O programa REUNE
- Redes de relações
- O Plano de negócios
- Empreendedor x gerente
- Idéia x invenção x oportunidade
- A Inovação



- O povo brasileiro é inovador ou criativo?
- Dilemas da Organização Inovadora
- A práxis da inovação tecnológica
- Fluxo de informação entre Universidade e indústria
- Patentes, Proteção Intelectual, transferência de tecnologia – legislação e uso
- A Sociedade do Conhecimento x Sociedade Industrial
- Incubadora de Empresas
- Processos e competências típicos de incubadoras e parques
- O Movimento Brasileiro de Incubadoras e Parques
- O financiamento ao Movimento
- Fomento ao Desenvolvimento C&T
- O financiamento à tecnologia
- A PITCE e a PDP
- Parques – Inovação e Empreendedorismo
- Modelos de Parques Tecnológicos
- Estratégia de posicionamento do Movimento (esferas da inovação)

METODOLOGIA

Seminários, discussão em grupo
Revisões críticas
Apresentações dos alunos
Ensino e aconselhamento pelos pares
Resolução de problemas reais
Debates
Casos
Análise de incidentes críticos
Imagens de papel e auto-identificação
Aprendizagem baseada no projeto
Abordagem de consultor/conselheiro
Aprendizado experimental
Avaliação pessoal ou dos parceiros
Investigação
Brainstorming
Plano de negócios

BIBLIOGRAFIA E MATERIAL DE CONSULTA OBRIGATÓRIA:

DOLABELA, F. ; O Segredo de Luiza, Cultura, Cultura, 1998.
DOLABELA, F. ; Quero Construir minha história, Sextante, 2009.
PRICE, R.W., Roadmap for entreperneurial success, AMACON, 2004.
Paladino, G.G. e Medeiros, L.A (ORG); Parques Tecnológicos e Meio Urbano, ANPROTEC/SEBRAE, 1997



Guedes M. e Fórmica, P. (org); A Economia dos Parques Tecnológicos; ANPROTEC, 1997.

O ESTÍMULO AO EMPREENDEDORISMO NOS CURSOS DE QUÍMICA: FORMANDO QUÍMICOS EMPREENDEDORES; Maria H. Araújo et alli, Quim. Nova, Vol. 28, Suplemento, S18-S25, 2005

Foresight 2020 -Economic, Industry and corporate trends The Economist Intelligence Unit, 2006.

Consulta obrigatória:

Artigos das Revistas Locus e Locus Científico (Edições da ANPROTEC)

Artigos da Revista Brasileira de Inovação e Parcerias Estratégicas (MCT/CGEE)

Vídeos sobre Cultura Empreendedora postados no Youtube

Filme : Fitzcarraldo, Werner Herzog, 158 min, 1982

Vídeo: Inovadores – Ford, Newton – Gates, The Biography Channel, 132 min, 2010.



Disciplina: Redação de Artigos Científicos

Carga Horária: 30 horas

Créditos: 02

Tipo: Obrigatória de Caráter Geral

Código: PPGQB073

Prof. Dr. Marco Aurélio de Paoli e Profa. Dra. Adriana Santos Ribeiro

Horário: Segunda à sexta durante o período de 29/02/2016 à 04/03/2016, das 09h à 12h

Local: Sala de Reuniões do IQB

OBJETIVO: Ensinar os alunos de pós-graduação como preparar um texto científico para ser publicado. No caso de um artigo científico, apresentar ao aluno todas as etapas desde a redação do primeiro rascunho, passando pelos trâmites burocráticos da submissão on-line e da resposta até a publicação final.

PROGRAMA:

1. A redação de textos científicos
 - 1.1. Publicações.
 - 1.2. Como escrever a publicação: etapas
 - 1.3. Comunicações em congressos
 - 1.4. Sugestões para confeccionar um painel e uma apresentação de slides
 - 1.5. Sugestões para montar as Figuras e Tabelas
 - 1.6. Como apresentar a bibliografia

2. Redação de uma publicação (será definido um cronograma para essas etapas)
 - 2.1. Definição do tema
 - 2.2. Apresentação do resumo do tema da publicação
 - 2.3. Entrega da seleção dos artigos a serem usados como referências
 - 2.4. Redação de um resumo de cada artigo usado como referência
 - 2.5. Redação da primeira versão da publicação
 - 2.6. Entrega da primeira versão da publicação

CRITÉRIO DE AVALIAÇÃO:

O aluno deverá entregar até o final do período um artigo escrito em inglês. A avaliação do desempenho do aluno levará em consideração o estágio em que se encontra o artigo, segundo os critérios abaixo.

Conceito A: artigo finalizado e sem restrições a submissão

Conceito B: artigo necessitando ajustes finais para ser submetido

Conceito C: artigo necessitando muitos ajustes antes de ser submetido

Conceito D: reprovado (não entregue pelo aluno)

BIBLIOGRAFIA:

1. U. Eco, "Comme si fa una tesi di laurea", Bompiani, Milano, 1977.



2. E. Schrödinger, <http://www.lecb.ncifcrf.gov/~toms/quotes.html>, 1/11/2001, 14:00 h.
3. L. Rey, "Planejar e redigir trabalhos científicos", 2a. edição, Editora Edgard Blücher, São Paulo, 2000.
4. M.O'Connor e F.P. Woodford, "Writing scientific papers in english", Elsevier, Amsterdam, 1977.
5. T. Spector, "Writing a scientific manuscript", J. Chem. Educ. 71 (1994) 47.
6. P.E. Bourne, Ten simple rules for getting published PLoS Computational Biology: Editorial, published 27 Apr 2007 10.1371/journal.pcbi.0030077.
7. P.E. Bourne, Ten simple rules for making good oral presentations. PLoS Computational Biology: Editorial, published 27 Apr 2007 10.1371/journal.pcbi.0030077
8. P. E. Bourne, Ten simple rules for a good poster presentation. PLoS Computational Biology: Editorial, Maio 2007.