NOME	**MECÂNICA QUÂNTICA**
Carga horária	10 créditos - 150 h
Docente responsável	Profa. Norberto Sanches Gonçalves
SIGLA	CTS09
Obrigatória	NÃO – Eletiva do Grupo A
Ementa	- Limites clássico e quântico: a dualidade onda-partícula da matéria e da radiação; - Estrutura geral da mecânica quântica: operadores, vetores de estados, números quânticos e probabilidades. Notação de Dirac. Relações de incerteza de Heisenberg. - Revisão da equação de Schrödinger e o hamiltoniano. Aplicações a sistemas simples: partícula livre, partícula na caixa, barreiras de potencial e efeito túnel, oscilador harmônico, rotor rígido; - Simetria e Teoria de Grupo; - O spin e a álgebra de momentos angulares. Leis de conservação. - Átomo de hidrogênio. Operadores de spin. Interação spin-órbita. Átomo de hélio e princípio da antissimetria. Determinantes de Slater e introdução a sistemas com mais de dois elétrons. Método de Hartree-Fock. - Métodos aproximados em mecânica quântica: teoria de perturbação e método variacional. Teoria de perturbação dependente do tempo. - Estrutura molecular. Aproximação de Born-Oppenheimer. Teoria dos orbitais moleculares. (Introdução à Teoria do Funcional da Densidade). - Estruturas fina e hiperfina. Teoria quântica de colisões e seções de choque. Férmions, bósons e sistemas de muitos corpos.
Bibliografia	• Quantum Mechanics, C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e F. Laloe, Wiley-Interscience, vols. I e II, 2006, ISBN-10: 0471569526. • Quantum Chemistry, Ira N. Levine, Prentice Hall, 6ª ed., 2008, ISBN-13: 9780136131069. • Molecular Quantum Mechanics, P. W. Atkins e R. S. Friedman, Oxford University Press, 3ª ed., 1999, ISBN: 019855947-X, ISBN-13: 9780198559474 • Modern Quantum Mechanics, J.J. Sakurai e J. J. Napolitano,Addison Wesley, 2ª ed., 2010, ISBN-10: 0805382917, ISBN-13:9780805382914. • "Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry, H. Haken, H.C. Wolf, W. D. Brewer, Springer, 2ª ed., 2004, ISBN-13: 9783540407928. • Physical Chemistry: A Molecular Approach, D. A. McQuarrie e J. D. Simon, University Science Books, 1997, ISBN: 9780935702996. • Introduction to Quantum Mechanics, D. J. Griffiths,Benjamin Cummings, 2ª ed., 2004, ISBN-10: 0131118927, ISBN-13: 9780131118928 • Quantum Mechanics, A. Messiah, Dover Science, 2000, ISBN: 0486409244, ISBN-13: 9780486409245. • Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory, L. D. Landau e L. M.Lifshitz, V. 3, Butterworth-Heinemann, 3ª ed., 1981, ISBN-10: 0750635398, ISBN-13: 9780750635394. • Quanta, Matéria e Mudança: Uma Abordagem Molecular para a Físico-Química, P. Atkins, J. de Paula e Ronald Friedman, LTC, vols. 1 e 2, 2011, ISBN: 9788521606062
Docentesenvolvidos	1. Norberto Sanches Gonçalves

	2. Lilia CoronatoCourrol

NOME	**PROCESSOS QUÍMICOS INDUSTRIAIS**
Carga horária	10 créditos - 150 h
Docente Responsável	Profa. Cristiane Reis
SIGLA	CTS11
Obrigatória	NÃO – Eletiva do Grupo A
Ementa	O objetivo geral deste curso é a apresentação e discussão de questões científicas para auxiliar na compreensão do conceito de sustentabilidade. Serão discutidos como a ciência e a tecnologia podem ser utilizadas para o desenvolvimento sustentável de uma sociedade. A disciplina será composta por 5 módulos que envolvem aulas sobre desenvolvimento de Processos Industriais (Módulo 1), destacando a Indústria de Polímeros (Módulo 2), Indústria Petroquímica (Módulo 3) e Processos Eletroquímicos (Módulo 4). Conceitos sobre Controle automático de processos também serão abordados (Módulo 5). Módulo 1: Desenvolvimento de Processos Industriais - Síntese de processo. - Fluxogramas de processo. - Balanços materiais e energéticos. - Dimensionamento de unidades de processos. - Avaliação econômica preliminar. - Otimização de Processos. Módulo 2: Processos da Indústria de Polímeros - Processamento de materiais poliméricos - Comportamento reológico e relação com processamento em polímeros - Relações entre estrutura macromolecular e parâmetros de processamento. - Técnicas de processamento: extrusão, (mono e dupla-rosca); Injeção e injeção e sopro; Termoformagem; Módulo 3: Processos da Indústria Petroquímica - Catalisadores Industriais. - Petróleo e Petroquímica. - Craqueamento catalítico. - Processos de refino para obtenção de combustíveis e lubrificantes. Módulo 4: Processos Eletroquímicos - Reatores Eletroquímicos: projetos e configurações - Transporte de massa e potencial eletroquímico - Cinética eletroquímica dos reatores Módulo 5: Controle automático de processos - Análise, projeto e síntese de controladores clássicos. - Estudo de controladores ótimos LQG e LQR, controladores avançados H∞, H2, controladores Fuzzy e as Redes Neurais. - Uso de ferramentas computacionais aplicadas ao projeto, a analise e a síntese de controladores no domínio do tempo e da freqüência para sistemas de uma entrada e uma saída e para sistemas multivariáveis. - Métodos e as técnicas de implementação de controladores analógicos e digitais.
Bibliografias	1. Optimization of chemical processes. T.F. Edgar, D.M. Himmelblau, L.S. Lasdon, New York: McGraw-Hill, 2001, ISBN: 0070189919.

	2. Basic principles and calculations in chemical engineering, D.M. Himmelblau, J.B. Riggs, New Jersey: Prentice Hall PTR, 7ªed., 2004,ISBN: 0131406345. 3. Principles of Polymer Processing, ZehevTadmor, Costas G. Gogos, Wiley-Interscience, 2ª ed., 2006, ISBN: 0471387703. 4. Rheology and Processing of Polymeric Materials, Volume 2: Polymer Processing, Oxford, 2006, ISBN:9780195187830. 5. Ludwig`s Applied process design for chemical and petrochemical plants, A. K. Coker, New Jersey: Prentice Hall, vol. 1, 4ª ed., 2007, ISBN-10: 9780750677660. 6. Applied process design for chemical and petrochemical plants, E.E. Ludwig, New Jersey: Prentice Hall, vol. 2, 3ª ed., 1997, ISBN-10: 0884151018. 7. Applied process design for chemical and petrochemical plants, E.E. Ludwig, New Jersey: Prentice Hall, vol. 3, 3ª ed., 2001, ISBN-10:9780884156512. 8. Industrial electrochemistry, Derek Pletcher and Frank C. Walsh, Springer, 2ª ed., 1990, ISBN: 0412304104, 9780412304101. 9. Instrumental Methods in Electrochemistry, Edited by Southampton Electrochemistry Group, Horwood Publishing, 2001, ISBN-10: 1898563802, ISBN-13: 9781898563808. 10. Process control Theory and applications, J.P. Corriou, Springer-Verlag, London, 2004, ISBN-10: 1852337761. 11. Multivariable Control Systems: An Engineering Approach (Advanced Textbooks in Control and Signal Processing), P. Albertos and A. Sala, Springer Verlag, 2003, ISBN-10: 1852337389.
Docentes envolvidos	1. Cristiane Reis Martins 2. Christiane de Arruda Rodrigues 3. Roselena Faez 4. Romilda Fernández Felisbino

NOME	**QUÍMICA ANALÍTICA AVANÇADA**
Carga horária	10 créditos - 150 h
Docente Responsável	Profa. Lucia Codognoto de Oliveira
SIGLA	CTS12
Obrigatória	NÃO – Eletiva do Grupo A
Ementa	Transmitir uma visão aprofundada sobre os aspectos principais envolvidos na geração e tratamento dos dados de um resultado analítico. Escolha de um método ambientalmente correto visando a menor produção de resíduos. - Introdução sobre química analítica. - Definição do problema (estudos de casos). Validação interna e externa, cartas de controle cálculo da incerteza analítica. - Precisão e exatidão necessárias, tipos de amostras, quantidade de amostras, número de amostras, custo analítico e limites de detecção e quantificação, teste de hipótese, ANOVA e regressão linear. - Amostragem. Cuidados a ser tomados ao escolher a porção a ser amostrada. - Preparo de amostras. Estocagem de amostras. Estabilidade de diferentes amostras biológicas. Produção de resíduos no preparo de amostras. - Sustentabilidade no método analítico (processos ambientalmente correto) no

	preparo e analise. - Fatores que afetam as medidas analíticas. - Calibração e validação (Discussões sobre confiabilidade metrológica). - Avaliação dos resultados (Discussões sobre aspectos clínicos, ambientais, tecnológicos, legais, entre outros). - Ação (Discussão de propostas para solução ou remediação do problema do método analítico. (Discussões sobre química limpa, sustentabilidade, portabilidade). - Estudo de métodos matemáticos, estatísticos e lógica aplicados no planejamento e tratamento de dados multivariados, buscando extrair do sistema em estudo o máximo de informação útil, fazendo um número mínimo de experimentos. - Gestão da qualidade (Princípios da Garantia da Qualidade, Boas Práticas de Laboratório).
Bibliografia	1. Chemometric Methods in Capillary Electrophoresis, Grady Hanrahan, Frank A. Gomez (Editores), Wiley, 2009, ISBN-10: 0470393297, ISBN-13: 9780470393291. 2. Using Mass Spectrometry for Drug Metabolism Studies, Walter A. Korfmacher,Taylor and Francis, 2ª ed., 2009 , ISBN-10: 1420092200, ISBN-13: 9781420092202. 3. Handbook of Capillary and Microchip Electrophoresis and Associated Microtechniques, JamesP. Landers, Publisher: CRC, 3ª ed., 2008, ISBN: 0849333296. 4. Introduction to Mass Spectrometry: Instrumentation, Applications, and Strategies for Data Interpretation, J. ThrockWatson,OrrinDavidSparkman, Publisher: Wiley, 4ª ed., 2007, ISBN-10: 0470516348, ISBN-13: 978047051634. 5. Analytical Chemistry, GaryD. Christian, Publisher: Wiley, 6ª ed., 2003, ISBN-10: 0471214728, ISBN-13: 9780471214724. 6. Fundamentals of Analytical Chemistry, Douglas A. Skoog, F. James Holler, Donald M. West, Stanley R. Crouch, Publisher: Brooks Cole, 8ª ed., 2003, ISBN-10: 0030355230, ISBN-13: 9780030355233.
Docentes envolvidos	1. Dário Santos Júnior 2. Lucia Codognoto de Oliveira

NOME	**TERMODINÂMICA E CINÉTICA AVANÇADA**
Carga horária	10 créditos - 150 h
Docente Responsável	Prof. Luciano Caseli
SIGLA	CTS16
Obrigatória	NÃO – Eletiva do Grupo A
Ementa	O objetivo geral deste curso é apresentar fundamentos de Termodinâmica e Cinética Química, aplicadas a transformações químicas e físicas elementares, processos industriais e bioquímicos, partindo de uma abordagem molecular. Módulo 1: Desenvolvimento da Termodinâmica a partir da função da Partição - Função de partição e Gases Ideais - Função de partição para estados eletrônicos e vibracionais Leis da termodinâmica – sistemas macroscópicos x microscópicos Módulo 2: Aplicações da Termodinâmica - Leis da Termodinâmica aplicada a processos industriais - Energia de Gibbs aplicada à formação de proteínas e membranas biológicas.

	- Aplicações da Termodinâmica a Equilíbrio de Fases - Descrição Termodinâmica das Misturas - Termodinâmica Envolvendo transporte de cargas - Bioenergética: transferência de elétrons. - Aplicações da Termodinâmica ao Equilíbrio Químico - Termodinâmica aplicada a sistemas coloidais e Interfaces Módulo 3: Termodinâmica de Processos Irreversíveis - Produção de entropia - Relação entre reações químicas e processos de difusão - Princípio de entropia mínima no estado estacionário - Estruturas Dissipativas - Caos Químico Módulo 4: Cinética Química - Fundamentos e Técnicas Experimentais para determinar velocidades de reações - Leis de velocidade de reações e constantes cinéticas, resposta à Temperatura - Superfícies de Energia Potencial - Cinética farmacológica: estudo de casos. - Mecanismos de reações: reações elementares e consecutivas, casos complexos - Estudo de casos: 1) Enovelamento de proteínas, 2) Catálise por enzimas controladas por difusão - Superfícies de Energia Potencial - Dinâmica de reações: teoria de colisões, e do estado de transição - Estudo de casos: 1) Efeito de sais em cinética química, 2) colisões moleculares de gases - Estudo de casos: 1) Transporte através de biomembranas, 2) Transferência de elétrons em sistemas biológicos (relação cruzada de Marcus)
Bibliografia	1. Thermodynamics and Kinetics for Biological Sciences, G. Gordon, Wiley-Interscience, 2000, ISBN-10: 0471374911 2. Thermodynamics and Kinetics in Material Science – A short Course, B.S. Bokstein, M.I. Mendelev, D.J.Srolovitz, Oxford University Press, 2005, ISBN-10: 0198528043 3. Chemical Kinetics and Dynamics, J.I.Steinfield, J.S.Francisco, W.L.Hase, Prentice Hall, 1998, ISBN-10: 0137371233 4. Statistical Mechanics, D.A. McQuarrie, University Science Books, 2000, ISBN-10: 1891389157 5. Physical Chemicistry: A molecular approach, D.A. McQuarrie, J.D. Simon, Sausalito: University Science Books, 1997, ISBN-10: 0935702887 6. Físico-Química Biológica, P. Atkins, J. de Paula, Rio de Janeiro: LTC, 2008, ISBN-10: 9788521616238 7. Reaction Kinetics, M.J.Pilling, P.W .Seakins, Oxford Science Publications, 2005, ISBN-10:019855527X 8. Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química, J.M. Smith, H.C. Van Ness, M.M.Abbott, LTC, 7ª ed., 2007, ISBN-10: 9788521615538 9. Thermodynamics, E. Fermi, Dover Publications, 2000, ISBN-10: 1607962381 10. Thermodynamics, Statistical Thermodynamics, & Kinetics, T. Engel, P. Reid, Prentice Hall, 3ª ed., 2012, ISBN-10:0321766180
Docentes envolvidos	1. Luciano Caseli 2. Romilda Fernandez Felisbino 3. João H. Lago

NOME	TÓPICOS ESPECIAIS EM BIOQUÍMICA
Carga horária	10 créditos - 150 h
Docente Responsável	Profa. Virginia Berlanga Campos Junqueira
SIGLA	CTS24
Obrigatória	NÃO – Eletiva do Grupo A
Ementa	Muitas das patologias crônicas não transmissíveis têm, na sua patogenia, o desenvolvimento de um ou mais distúrbios metabólicos. Compreender a natureza molecular destes distúrbios é o primeiro passo para o desenvolvimento de terapias e de moléculas com atividade terapêutica primária ou secundária, que melhorem a qualidade de vida e, consequentemente, reduzam o alto índice de mortalidade associado a estas doenças. Neste sentido, esta disciplina abordará aspectos relacionados à regulação do metabolismo e alterações bioquímicas envolvidas no estabelecimento das principais doenças metabólicas. Também serão discutidas as bases do reconhecimento molecular em sistemas biológicos, com exemplos ilustrativos dos fenômenos de interação fármaco-alvos biológicos, tais como enzimas, receptores, proteínas, material genético etc. Módulo 1: Regulação do metabolismo celular - Catabolismo e anabolismo – compartimentalização e especificidades - Integração do metabolismo celular e regulação alostérica das vias. - Outros mecanismos de regulação do metabolismo: regulação hormonal, regulação redox, nitração, nitrosilação, denitrosilação e sinalização celular. Módulo 2: Distúrbios Metabólicos e processos bioquímicos em: - Obesidade - Diabetes - Dislipidemias e aterosclerose - Hipertensão - Erros inatos do metabolismo - Infecções - Neoplasias
Bibliografias	1. Pathologic basics of diseases, A.K. Abbas,N. Fausto, V.M.D. Kumar, J. Aster, Robbins&Cotran, Editora: Elsevier, 8ª ed., 2009, ISBN-10: 1416031219. 2. Foye's Principles of Medicinal Chemistry, T.L. Lemke and D.A. Williams, Editora: Lippincott Williams & Wilkins, 6ª ed., 2008, ISBN-10: 0781768799. 3. Endocrine Physiology, P.E. Molina ,Editora: McGraw-Hill, 2ª ed., 2006. ISBN-10: 0071460489. 4. Pathology: Clinicopathologic Foundations of Medicina, E. Rubbin, Editora: Lippincott Williams & Wilkins, 5ª ed., 2008, ISBN-10: 0781795168. 5. Biochemestry, L. Strayer, J.M. Berg, J.L. Tymoczko, Editora: H. W. Freeman and Company, 6ª ed., 2008, ISBN-10: 0716746840. 6. Artigos de Pesquisa e revisão, selecionados de revistas periódicas indexadas.
Docentes envolvidos	1. Virginia Berlanga Campos Junqueira

NOME	QUÍMICA INORGÂNICA AVANÇADA
Carga horária	10 créditos - 150 h
Docente Responsável	Prof. Celso Molina
SIGLA	CTS33
Obrigatória	NÃO – Eletiva do Grupo A
Ementa	• Teoria de Grupo, Simetria Molecular e Aplicações; • Compostos de Coordenação: Espectroscopia Eletrônica de Elementos do bloco d e f, estrutura, propriedades, ligações; • Compostos Organometálicos dos Elementos do Bloco d e f e Aplicações; e • Sólidos Inorgânicos: Estrutura, ligações e Propriedades.
Bibliografias	1. Materials Science and Enginnering: An introduction, William D. Callister, Jr., David G. Rethwisch, 8a ed., Wiley, 2009, ISBN-13: 9780470419977. 2. Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity, James E. Huheey, Ellen A. Keiter and Richard L. Keiter, Haper Collins, 4 a ed., 1993, ISBN: 006042995X. 3. Química Inorgânica, Shriver e Atkins, 4a Edição, Bookman, 2008, ISBN: 9788577801992. 4. Química Inorgânica não tão concisa, J. D. Lee, 5a Edição, Blucher, ISBN: 85-212-0176-1. 5. Solid State Chemistry: An Introduction, L. E. Smart e E. A. Moore, Third Edition, 2005, CRC Press, ISBN-10: 0748775161, ISBN-13: 978-0748775163. 6. Advanced Inorganic Chemistry, F. A Cotton, G. Wilkinson, 5 a ed., New York: John Wiley,1988, ISBN: 0-471-84997-9. 7. Group Theory and Chemistry, David M. Bishop, First edition, 1993, ISBN-10: 0-486-67355-3, ISBN-13: 978-0-486-67355-4.
Docentes envolvidos	1. Celso Molina 2. Marcos A. Bizeto 3. Paula S. H. Ferreira 4. Tereza S. Martins

NOME	Química Orgânica Avançada
Carga horária	10 créditos – 150 h
Docente Responsável	Prof. João Valdir Comasseto
SIGLA	CTS28
Obrigatória	NÃO –Eletiva do Grupo A
Ementa	1 . Ligação Química e Estrutura das Moléculas

	2 . Deslocalização e Conjugação 3 . Acidez, Basicidade e pKa 4 . Reações Orgânicas 5 . Estereoquímica 6 . Análise Conformacional 7 .Substituição Nucleofílica em Carbono Saturado 8 . Reações de Eliminação 9 . Adição de Eletrófilos a Alquenos 10 . Reações de Adição ao Grupo Carbonilico 11 . Reações de Substituição no Grupo Carbonílico 12. Mecanismos de Reações Orgânicas 13 . Compostos Organometálicos na Formação de Ligação C-C 14 . Química de Enolatos 15 . Reações Periciclicas
Bibliografia	1 . Organic Chemistry, J. Clayden, N. Greever, S. Warren, Oxford University Press, Oxford, 2012, ISBN-10: 0199270295 e ISBN-13: 978-0199270293. 2 . Advanced Organic Chemistry, F. A. Carey e R. J. Sundberg, Springer, N. Y., 2007, ISBN 978-0-387-44899-2 3.Advanced Organic Chemistry, Part A: Structure and Mechanisms, Francis A. Carey, Richard J. Sundberg, Springer, 5ª ed., 2008, ISBN-10: 0387683461 e ISBN-13: 978-0387683461. 4. Advanced Organic Chemistry: Part B: Reaction and Synthesis, Francis A. Carey, Richard J. Sundberg, 5a ed. ISBN-10: 0387683542 e ISBN-13: 978-0387683546.
Docentes envolvidos	2. Cristiano Raminelli 3. Fernanda Ferraz Camilo 4. João H. G. Lago 5. João Valdir Comasseto