

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

COMPONENTE CURRICULAR: ANÁLISE EM FLUXO

CARGA HORÁRIA: 60 horas

NUMERO DE CRÉDITOS: 04

PRÉ-REQUISITOS: Não tem

PÚBLICO-ALVO: Bacharelado em Química e Licenciatura em Química

OBJETIVOS Abordar a fundamentação teórica e instrumentação de diversas técnicas de análise em fluxo para automatizar procedimentos de análise química quantitativa. Discutir as potencialidades, limitações e aplicações de diferentes modalidades de análise em fluxo.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Compreender a evolução dos sistemas automáticos de análise química. Compreender e discernir os fundamentos, as potencialidades e limitações das diversas modalidades das técnicas de análise em fluxo. Saber aplicar a técnica de análise em fluxo apropriada ao problema analítico de interesse.

EMENTA / PROGRAMA

SISTEMAS AUTOMÁTICOS DE ANÁLISE QUÍMICA - Introdução, Classificação e Instrumentação.

INTRODUÇÃO À ANÁLISE EM FLUXO - Classificação, Componentes e Configurações dos sistemas de Análise em Fluxo.

SISTEMAS DE ANÁLISE EM FLUXO - Análise por Injeção em Fluxo (FIA), Análise em Fluxo Segmentado (SFA), Análise em Fluxo Monosegmentado (MSFA), Análise em Fluxo Contínuo (CFA), Análise em Fluxo-Batelada (FBA), Análise por Injeção Seqüencial (SIA), Multicomutação em Análise em Fluxo (MFA)

METODOLOGIA

Aulas expositivas. Debates e apresentação de seminários.

AVALIAÇÃO

Realização de provas e seminários (workshop), bem como a participação nas aulas teóricas demonstrando domínio das técnicas.

BIBLIOGRAFIA

1. RUZICKA, J; *Flow Injection Analysis*, Wiley & Sons, N. York, 1988.
2. VALCARCEL, M, LUQUE DE CASTRO, M. D.; *Flow-Injection Analysis – Principles and Applications*, Ellis Horwood, Chichester, 1987.
3. KALBERG, B., PACEY, G. E.; *Flow Injection Analysis. A Practical Guide*, Elsevier, 1989.
4. BURGUERA, J. L., *Flow Injection Atomic Spectroscopy*, M. Decker Inc., N. York, 1989.
5. CALATAYUD, J.M.; *Flow Injection Analysis of Pharmaceuticals – Automation in the Laboratory*; Taylor & Francis, London, 1996.
6. JARBAS, J. R. ROHWEDDER ET AL, *Análise em Fluxo em CD-ROM*, 1999.
7. Artigos recentes da literatura.

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

COMPONENTE CURRICULAR: ANÁLISE QUIMIOMÉTRICA MULTIVARIADA

CARGA HORÁRIA: 60 horas

NUMERO DE CRÉDITOS: 04

PRÉ-REQUISITOS: Introdução à Álgebra Linear

PÚBLICO-ALVO: Bacharelado em Química e Licenciatura em Química

OBJETIVOS Abordar os conceitos e princípios de técnicas quimiométricas para análise multivariada e suas potencialidades e limitações na abordagem de problemas de interesse da pesquisa e desenvolvimento na ciência. Discutir também sua utilidade para o controle de processos e produtos na indústria.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Compreender os conceitos e fundamentos teóricos de técnicas quimiométricas multivariadas. Conhecer as potencialidades, limitações e aplicações dessas técnicas a problemas de natureza multivariada, bem como sua utilidade para o controle de processos e produtos. Saber selecionar um método adequado à abordagem do problema de interesse. Mostrar desenvoltura e eficiência na realização de experimentos envolvendo aplicações das técnicas estudadas.

EMENTA / PROGRAMA

INTRODUÇÃO. Definições e Terminologias.

DEFININDO O PROBLEMA. Conhecendo o Sistema; Conhecendo o Problema; Conhecendo a Visão Quimiométrica; Planejamento Experimental: Benefícios do Planejamento Experimental, Etapas do Planejamento do Experimento.

PRÉ-PROCESSAMENTO. Pré-processando as Amostras: Normalização, Ponderação, Filtragem de Ruído Aleatório, Correção da Linha de Base; Pré-processando as Variáveis: Centralização na Média, Ponderação: Por informação a Priori, Escalonamento da Variância, Autoescalonamento, Seleção de Variáveis; Aplicações.

RECONHECIMENTO DE PADRÕES (RP). Introdução; Métodos de RP não Supervisionados: Hierarchical Cluster Analysis (HCA), Principal Components Analysis (PCA); Métodos de RP Supervisionados: K-Nearest Neighbor (KNN), Soft Independent Modelling of Class Analogies (SIMCA); Resumo de Métodos de RP Supervisionados. Aplicações.

CALIBRAÇÃO MULTIVARIADA. Introdução; Métodos Clássicos (CLS) Diretos e Indiretos; Métodos Inversos: Regressão Linear Múltipla (MLR), Regressão em Componentes Principais (PCR), Regressão em Mínimos Quadrados Parciais (PLS); Aplicações.

METODOLOGIA

Aulas expositivas, aulas práticas em laboratório e de exercícios. Apresentação de seminários.

AVALIAÇÃO

Realização de provas e seminários (workshop), bem como a participação nas aulas teóricas e práticas demonstrando domínio das técnicas.

BIBLIOGRAFIA

1. BEEBE, K. R., PELL, R. J., SEASHOLTZ, M. B., *Chemometrics – A Practical Guide*, 1998
2. MARTENS, H., NAES, T., *Multivariate Calibration*, Ed. Wiley, N. York, 1993.
3. MASSART, D. L., VANDEGINSTE, B.G.M., DEMING, S. N., MICHOTTE, Y., KAUFMAN, L., *Chemometrics: A Textbook*, Elsevier Science Publishers, Amsterdam, 1988.
4. OTTO, M., *Chemometrics – Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry*, Ed. Wiley, N. York, 1999.
5. Artigos recentes da literatura.

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

COMPONENTE CURRICULAR: ANÁLISE TÉRMICA
CARGA HORÁRIA: 30 horas
NUMERO DE CRÉDITOS: 02
PRÉ-REQUISITOS: Química Básica - Transformações
PÚBLICO-ALVO: Bacharelado em Química e Licenciatura

OBJETIVOS Abordar conceitos, princípios e instrumentação de técnicas baseadas em medidas de propriedades térmicas da matéria. Discutir as limitações e potencialidades dessas técnicas, assim como algumas aplicações à análise química qualitativa e quantitativa.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Conhecer os fundamentos básicos da análise térmica como técnica de caracterização e quantificação de materiais. Entender os princípios das diferentes técnicas e compreender o funcionamento dos equipamentos utilizados em cada tipo de análise. Saber as limitações dos métodos, sobre a escolha de parâmetros e fontes de erros. Tomar conhecimento dos métodos mais recentes e suas combinações, tais como TG/DTA, DTA/DSC. Reconhecer e interpretar as curvas termogravimétricas para determinação da composição do material analisado.

EMENTA / PROGRAMA

INTRODUÇÃO: definição e apresentação das técnicas.

TERMOGRAVIMETRIA (TG): curvas, instrumentação, fatores que afetam os resultados, aplicações.

ANÁLISE TÉRMICA DIFERENCIAL (DTA): princípios básicos, calibração e interpretação das curvas, instrumentação, aplicações.

CALORIMETRIA DE VARREDURA DIFERENCIAL (DSC): DSC com fluxo de calor, DSC por compensação de energia. Fatores experimentais e instrumentais. Análises qualitativas e quantitativas. Aplicações.

ANÁLISE DOS GASES DESPRENDIDOS (EGA): fundamentos, acoplamento com técnicas de análise térmica e de detecção (cromatografia gasosa e espectrofotometria na região do infravermelho. Aplicações.

METODOLOGIA

Aulas expositivas, aulas práticas demonstrativas em laboratório. Apresentação de seminários.

AVALIAÇÃO

Realização de seminários, provas escritas, participação nas aulas teóricas e experimentais.

BIBLIOGRAFIA

1. SKOOG, D. A., LEARY, J. J., *Princípios de Análise Instrumental*, 5ª ed., Artmed Editora, Porto Alegre, 2002.
2. MERMET, J. M et al. *Analytical Chemistry*. Wiley-VCH, 1997.
3. VOGEL, A.; MENDHAN, M. A., et al. *Análise Química Quantitativa*. 6ª ed. LTC - Técnicos e Científicos, Rio de Janeiro, 2002.

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Componente Curricular: CATÁLISE (OPTATIVA)

Carga Horária: 60 horas.

Numero de Créditos: 04

Pré-Requisitos: CINÉTICA QUÍMICA

Público-alvo: Bacharelado em Química.

OBJETIVOS: Introduzir os fundamentos da catálise. Classificar os catalisadores baseado em aspectos estruturais e da sua atuação nos diversos sistemas. Introduzir as principais rotas de síntese. Introduzir a catálise ambiental.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Compreender os aspectos estruturais relacionados aos diversos tipos de catalisadores, sua importância nos processos industriais e ambientais, assim como as várias possibilidades de síntese desses materiais.

EMENTA / PROGRAMA

CONCEITOS GERAIS EM CATÁLISE A relação catálise, termodinâmica e cinética.

OS DIVERSOS SISTEMAS CATALÍTICOS PROPRIEDADES DOS CATALISADORES SÓLIDOS Vantagem da catálise heterogênea; Porosidade dos catalisadores; Caráter químico dos sítios ativos; Catalisadores metálicos, Catalisadores semi-condutores, Catalisadores ácido-base; Catalisadores bifuncionais.

A SÍNTESE DE CATALISADORES Os vários métodos de síntese

CATÁLISE AMBIENTAL Preparo e caracterização dos catalisadores verdes; Avaliação de catalisadores para a redução das emissões gasosas de fontes móveis e estacionárias.

METODOLOGIA

Aulas expositivas e seminários.

AVALIAÇÃO :

Provas escritas e seminários.

BIBLIOGRAFIA

1. PARSHALL, G. W., Ittel, S. D., *Homogeneous catalysis*, Wiley, Nova York: 1992.
2. MASTERS, C. *Homogeneous Transition-Metal Catalysis: A Gentle Art*, Chapman and Hall: Nova York, 1981.
3. CIOLA, R. *Fundamentos de Catálise*, Ed. Moderna: São Paulo, 1981.
4. GUINEST, M, RIBEIRO, F.R. *Zeólitos: Um Nanomundo ao Serviço da Catálise*. Ed. Fundação Calouste Gulbenkian: Lisboa, 2004.
5. BUFFON, R. *Catálise Por Compostos De Coordenação* . Ed. UNICAMP: São Paulo, 2005.
6. GATES, B., *Catalytic Chemistry*, Wiley: New York, 1992.

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Componente Curricular: DINÂMICA DA TRANSFERÊNCIA DE ELÉTRONS (OPTATIVA)

Carga Horária: 30 horas.

Numero de Créditos: 02

Pré-Requisitos: FÍSICO-QUÍMICA-II

Público-alvo: Bacharelado em Química, Licenciatura em Química e Química Industrial.

OBJETIVOS: Estudar os fenômenos que ocorrem nas interfaces eletrodo-solução. Definir e abordar os diversos tipos de modelos para a dupla camada elétrica. Explorar alguns fenômenos eletrocinéticos tais como eletroforese, eletromose, etc. Estudar a cinética de transferência de cargas nas interfaces eletrodo-solução. Abordar as leis da cinética nos eletrodos. Trabalhar a energia de Gibbs de ativação para estes sistemas. Deduzir a equação de Butler-Volmer. Aplicar os limites de sobretensão. Estudar alguns aspectos experimentais da cinética eletroquímica utilizando a voltametria.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Complementar o estudo de Eletroquímica de Equilíbrio introduzido na disciplina Físico-Química II e fornecer uma oportunidade para se estudar os processos de eletrodo. Abordar o conceito de dupla camada elétrica e visualizar, qualitativamente, os diversos modelos de interface eletrodo-solução. A partir dos modelos de interface derivar a equação de Butler-Volmer. Estudar a velocidade de transferência de cargas nas interfaces carregadas. Adquirir a habilidade de calcular a energia de Gibbs de ativação para o processo de transferência de elétrons.

EMENTA/PROGRAMA

FENÔMENOS INTERFACIAIS

1. A dupla camada elétrica. Modelos de interface eletrodo-solução.
2. Eletrodos polarizados e não-polarizados. A dupla camada difusa.
3. Fenômenos eletrocinéticos.

PROCESSOS EM ELETRODOS

1. Cinética eletroquímica. Energia de Gibbs de ativação. A equação de Butler-Volmer. Limites de sobretensão.
2. Voltametria

METODOLOGIA

Aulas expositivas e de exercícios. Uso de programas específicos para resolução de problemas. Apresentação de seminários.

AVALIAÇÃO

Realização de exercícios e seminários, provas escritas e participação nas aulas.

BIBLIOGRAFIA

1. ATKINS, P. W., "Físico-Química", 7ª Ed., Vol. III, Editora LTC: Rio de Janeiro, 2003.
2. CASTELLAN, G., "Fundamentos de Físico-Química", Editora LTC: Rio de Janeiro, 1989.
3. D. R. CROW, "Principles and Applications of Electrochemistry", 4ª Ed., BA Professional: New York, 1996.
4. LEVINE, I. N., "Physical Chemistry", 5ª Ed., McGraw-Hill: New York, 2001.
5. BARROW, G. M., "Physical Chemistry", 6ª Ed., McGraw-Hill: New York, 1996.
6. MCQUARRIE, D.A., SIMON, J.D., "Physical Chemistry: A Molecular Approach", University Science Books: Califórnia, 1997.
7. ALBERTY, R. A., SILBEY, R. J., "Physical Chemistry", 2ª Ed., J. Willey, N.Y., 1996.
8. CROPPER, W.H., "Mathematica Computer Programs for Physical Chemistry", Springer, 1998.
9. ANDRADE L. N., "Introdução à Computação Algébrica com o MAPLE", 1ª Ed., Editora da Sociedade Brasileira de Matemática, 2004.

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

COMPONENTE CURRICULAR: ESPECTROMETRIA NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO

CARGA HORÁRIA: 30 horas

NUMERO DE CRÉDITOS: 02

PRÉ-REQUISITOS: Química Analítica Qualitativa Experimental e Química Analítica Quantitativa Experimental

PÚBLICO-ALVO: Bacharelado em Química e Licenciatura em Química

OBJETIVOS Abordar os conceitos, fundamentos e instrumentação da Espectrometria no Infravermelho Próximo (NIR). Discutir suas limitações, potencialidades e aplicações à análise química quantitativa. Abordar os fundamentos de técnicas quimiométricas comumente utilizadas na construção de modelos baseados em espectros NIR.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Compreender os conceitos, fundamentos teóricos e a instrumentação da espectrometria no infravermelho próximo. Conhecer as potencialidades, as limitações e as aplicações da espectrometria no infravermelho próximo para fins de análises qualitativas e quantitativas. Demonstrar desenvoltura e eficiência na realização de experimentos envolvendo aplicações da técnica instrumental estudada.

EMENTA / PROGRAMA

INTRODUÇÃO À ESPECTROMETRIA VIBRACIONAL. Conceitos e Terminologias; Sinal e Ruído, Relação Sinal/Ruído e Fontes de Ruídos; Figuras de Mérito; Osciladores Harmônicos e Anarmônicos.

ESPECTROMETRIA NA REGIÃO DO INFRAVERMELHO PRÓXIMO (NIR) - Radiação Eletromagnética; Técnicas de Medidas Espectrais no NIR; Espectros NIR: Transmitância, Absorbância e Reflectância Difusa;

INSTRUMENTAÇÃO PARA ESPECTROMETRIA NIR: Componentes e Tipos de Instrumentos: Acessórios para Medidas de Reflectância Difusa e Transflectância; Análises Qualitativa e Quantitativa: Técnicas Quimiométricas Usuais Empregadas no Tratamento de Dados NIR; Aplicações Analíticas.

METODOLOGIA

Aulas expositivas, aulas práticas em laboratório e de exercícios. Apresentação de seminários.

AVALIAÇÃO

Realização de exercícios e seminários, provas escritas, elaboração de relatórios, participação nas aulas teóricas e experimentais com domínio das técnicas e cuidados adotados no laboratório químico.

BIBLIOGRAFIA

1. WILLIAMS, P.; NORRIS, K., Eds., *Near-Infrared Technology*, 2^a ed. , American Association of Cereal Chemistry, Inc., St. Paul, Minnesota, 2001.
2. SKOOG, D. A.; LEARY, J. J., *Princípios de Análise Instrumental*, 5^a ed., Artmed Editora, Porto Alegre, 2002.
3. BURNS, D. A; CIURCZAK, E. W., *Handbook of Near-Infrared Analysis*, Marcel Dekker, Inc., N. York, 1992.
4. NAES, T., ISAKSSON, T., FEARN, T.; DAVIES, T. *Multivariate Calibration and Classification*, NIR Publications, Chichester-UK, 2002.

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

COMPONENTE CURRICULAR: HISTÓRIA DA QUÍMICA

CARGA HORÁRIA: 30 horas

NUMERO DE CRÉDITOS: 02

PRÉ-REQUISITOS: Não tem

PÚBLICO-ALVO: Bacharelado em Química e Licenciatura em Química

OBJETIVOS

Apresentar o desenvolvimento dos conceitos de Química em uma visão histórica. Mostrar por meio do exemplo histórico como as teorias científicas são desenvolvidas.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Compreender o desenvolvimento da química como uma ciência. Entender suas origens práticas e como, posteriormente, suas teorias se desenvolveram. Ao fim do curso espera-se que o aluno não só conheça vários episódios da história da química, mas principalmente desenvolva uma compreensão de como o conhecimento foi construído de uma maneira nem sempre direta, e de como continua sendo construído nos dias de hoje.

EMENTA / PROGRAMA

AS ORIGENS DA QUÍMICA A FILOSOFIA NATURAL. A alquimia greco-egípcia, a alquimia árabe, a alquimia na idade média, Paracelso e a Iatroquímica.

A CONSTRUÇÃO DAS BASES CIENTÍFICAS DA QUÍMICA. Os questionamentos da teoria aristotélica e a reação da Inquisição. Os gases. A descoberta dos elementos. A teoria do flogístico. A revolução química (Lavoisier).

A TEORIA ATÔMICA E A TABELA PERIÓDICA As leis estequiométricas. A teoria atômica de Dalton. As massas atômicas. Átomos e Moléculas. Berzelius: Símbolos, Fórmulas e Equações. Mendeleiev e a Tabela Periódica.

A QUÍMICA ORGÂNICA. O vitalismo. Substâncias orgânicas e inorgânicas. Wöhler e a síntese da uréia. A teoria estrutural de Kekulé. A química em 3 dimensões.

A FÍSICO-QUÍMICA. Termodinâmica, Inícios da físico-química: Van't Hoff, Ostwald e Arrhenius. O elétron na química. Cinética Química. A radioatividade. A Química Quântica.

A QUÍMICA E AS GRANDES GUERRA. Haber e as armas químicas. Nobel, explosivos e pacifismo. Oppenheimer e a bomba atômica. Implicações morais do uso da química.

METODOLOGIA

Aulas expositivas. Debates e apresentação de seminários.

AVALIAÇÃO

Participação nas aulas. Realização de trabalhos diversos sobre história da química. Seminários e exposição dos trabalhos em um *workshop* no final do curso.

BIBLIOGRAFIA

1. O sonho de Mendeleiev, A verdadeira História da Química. Paul Strathern, editora JZE, Rio de Janeiro, 2002
2. Livros da coleção CIENTÍSTAS *em 90 minutos* e FILÓSOFOS *em 90 minutos* de Paul Strathern, editora JZE, Rio de Janeiro.
3. Livros da coleção Imortais da Ciência, vários autores, Odysseus Editora.

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Componente Curricular: LIGAÇÃO QUÍMICA – UMA VISÃO QUÂNTICA (OPTATIVA)

Carga Horária: 60 horas.

Numero de Créditos: 04

Pré-Requisitos: QUÍMICA QUÂNTICA E ESPECTROSCOPIA

Público-alvo: Bacharelado em Química.

OBJETIVOS: Mostrar como a química quântica pode ser utilizada no entendimento da ligação química. Confrontar o formalismo da teoria do orbital molecular com o da teoria de valência, juntamente com suas vantagens e desvantagens. Mostrar que a força de uma ligação está relacionada à superposição dos orbitais que a formam. Mostrar a necessidade da hibridização como forma de aumentar a capacidade de ligação de um dado orbital. Entender como o diagrama de correlação dos orbitais pode ser utilizado para explicar importantes conceitos relacionados à estabilidade da ligação química. Mostrar como os orbitais moleculares são utilizados na construção da função de onda molecular. Mostrar como a ligação iônica resulta de um caso limite da ligação covalente, no qual há uma grande diferença entre as eletronegatividades dos átomos envolvidos. Mostrar como a teoria de bandas em metais e sólidos covalentes resulta da aplicação da teoria dos orbitais moleculares.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Ser capaz de explicar as diferenças entre a teoria da ligação de valência e a teoria do orbital molecular. Ser capaz de mostrar a equivalência entre estes formalismos, nos seus respectivos limites. Ser capaz de correlacionar propriedades moleculares como geometria e força de ligação de moléculas simples com os seus respectivos diagramas de orbitais moleculares. Ser capaz de construir funções de ondas moleculares, para casos relativamente simples, a partir dos orbitais moleculares. Ser capaz de explicar o tratamento simplificado dado às ligações iônicas, como um caso limite da total falta de covalência. Ser capaz de correlacionar as estruturas de bandas com as propriedades elétricas e térmicas de metais, semicondutores e isolantes.

EMENTA / PROGRAMA

Mecânica Quântica: A função de onda, Equação de Schrodinger, Aproximação de Born-Oppenheimer; Tratamento exato e variacional para o íon molecular H_2^+ ; A teoria de Heitler-London e da ligação de valência como forma de tratar a ligação covalente; Teoria dos orbitais moleculares e a sua utilização na construção da função de onda molecular; Ligações iônicas e Ligações metálicas; Sólidos covalentes.

METODOLOGIA

Aulas expositivas.

AVALIAÇÃO :

Provas escritas e seminários.

BIBLIOGRAFIA

1. DEKOCK, R. L.; Gray, H. B., *Chemical Structure and Bonding*, University Science Books, 1989.
2. PAULING, L.; Wilson, Jr., E. B., *Introduction to Quantum Mechanics (with application to chemistry)*, Dover, 1963.
3. PAULING, L., *The Nature of Chemical Bond: Structural Properties.*, 3rd ed., Cornell University Press, Itahaca, NY, 1960.

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Componente Curricular: MÉTODOS COMPUTACIONAIS EM QUÍMICA (OPTATIVA)

Carga Horária: 60 horas.

Numero de Créditos: 04

Pré-Requisitos: QUÍMICA QUÂNTICA E ESPECTROSCOPIA

Público-alvo: Bacharelado em Química.

OBJETIVOS: Introduzir as principais aproximações e limitações envolvidas nos métodos de química quântica e mecânica molecular. Demonstrar como esses métodos podem ser utilizados na obtenção de propriedades moleculares de interesse químico. Apresentar o formalismo envolvido na construção dos mesmos, utilizando o método de Hartree-Fock como ponto de partida. Dar início ao uso de ferramentas computacionais para resolução de problemas numéricos e algébricos

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Compreender a utilização dos métodos de química quântica como uma ferramenta de auxílio na obtenção de propriedades moleculares. Saber escolher um método/técnica apropriado para resolver um determinado problema acerca de sistemas atômicos e moleculares. Compreender e interpretar os resultados obtidos a partir de um cálculo de química quântica e mecânica molecular. Estabelecer relações entre a estrutura eletrônica e as propriedades moleculares. Dar início ao uso de ferramentas computacionais para resolução de problemas numéricos e algébricos

EMENTA/PROGRAMA

Mecânica molecular: Equações de Newton aplicadas a sistemas moleculares; Funções de energia potencial utilizadas em simulação; Propriedades obtidas a partir de uma simulação; O método de Monte Carlo; Simulação de líquidos e biomoléculas

Métodos *ab-initio*: Determinantes de Slater; O método de Hartree-Fock; O método de Hartree-Fock Roothan e a aproximação LCAO; Resolução iterativa das equações de Hartree-Fock; Falhas do método de Hartree-Fock; Correlação eletrônica e métodos pós-Hartree-Fock; Métodos perturbativos e variacionais;

Métodos semi-empíricos: Principais aproximações envolvidas na construção de um método semi-empírico; Parametrização; Os principais métodos semi-empíricos;

Métodos DFT: As equações de Kohn-Sham e a densidade eletrônica; Principais aproximações e métodos envolvidos na teoria DFT.

METODOLOGIA

Aulas expositivas.

AVALIAÇÃO :

Provas escritas e seminários.

BIBLIOGRAFIA

1. JENSEN, F., *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons Ltd.: London, 2002.
2. CRAMER, C.J., *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*, John Wiley & Sons Ltd.: London, 2nd Edition, 2002.
3. SZABO, A; OSTLUND, N. S., *Modern Quantum Chemistry : Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, McGraw-Hill Publishing Company, New York, 1989.
4. POPLE, J.A.; Beveridge, D. L., *Approximate Molecular Orbital Theory*, McGraw-Hill, New York, 1970, Series in Advanced Chemistry.

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

COMPONENTE CURRICULAR: MÉTODOS DE SOLUBILIZAÇÃO DE AMOSTRAS

CARGA HORÁRIA: 30 horas

NUMERO DE CRÉDITOS: 02

PRÉ-REQUISITOS: Química Básica - Transformações

PÚBLICO-ALVO: Bacharelado em Química e Licenciatura em Química

OBJETIVOS Abordar conceitos, princípios e instrumentação de técnicas de solubilização de amostras. Discutir as limitações e potencialidades dessas técnicas, assim como suas aplicações à análise química.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Conhecer os fundamentos básicos da análise química e a seqüência analítica. Compreender os tratamentos preliminares de manipulação de amostras e aspectos de segurança. Saber aplicar técnicas de decomposição e solubilização de compostos inorgânicos, tais como dissolução ácida e fusão. Conhecer e saber aplicar técnicas de decomposição de materiais orgânicos por via seca e por via úmida. Tomar conhecimento dos métodos recentes de solubilização.

EMENTA / PROGRAMA

INTRODUÇÃO: definição e apresentação das técnicas.

DECOMPOSIÇÃO ÁCIDA: ácidos e suas misturas, cuidados na manipulação dos ácidos, aplicações.

FUSÃO: princípios básicos, tipos de fundentes, instrumentação, aplicações.

DECOMPOSIÇÃO DE MATERIAIS ORGÂNICOS: decomposição por via seca e por via úmida, aplicações.

OUTROS MÉTODOS DE SOLUBILIZAÇÃO: fundamentos, instrumentação, aplicações.

METODOLOGIA

Aulas expositivas, aulas práticas em laboratório. Apresentação de seminários.

AVALIAÇÃO

Realização de seminários, provas escritas e práticas, participação nas aulas teóricas e experimentais.

BIBLIOGRAFIA

1. HARRIS, D.C., *Análise Química Quantitativa*. 6ª ed., LTC – Livros Técnicos e Científicos, Rio de Janeiro, 2005.
2. ANDERSON, J., *Sample Pretreatment and Separation*, Analytical Chemistry by Open Learning. John Wiley, Chichester, 1991.
3. VOGEL, A.; MENDHAN, M. A., et al. *Análise Química Quantitativa*. 6ª ed. LTC - Técnicos e Científicos, Rio de Janeiro, 2002.
4. Artigos científicos.

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

COMPONENTE CURRICULAR: METROLOGIA EM QUÍMICA

CARGA HORÁRIA: 30 horas

NUMERO DE CRÉDITOS: 02

PRÉ-REQUISITOS: Química Analítica Quantitativa Experimental

PÚBLICO-ALVO: Bacharelado em Química e Licenciatura em Química

OBJETIVOS Promover a formação de profissionais habilitados a trabalhar em ambiente de controle de qualidade com ênfase na qualidade do resultado da medida química.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Adquirir conhecimentos e desenvolver habilidades na área de metrologia química e aprender a realizar um experimento dentro das características de qualidade e confiabilidade, através do domínio dos métodos, de sua validade e adequação a medida desejada e da magnitude de suas incertezas.

EMENTA / PROGRAMA

CALIBRAÇÃO E RASTREABILIDADE DAS MEDIÇÕES EM LABORATÓRIOS DE CALIBRAÇÃO E ENSAIOS.

Calibração, Rastreabilidade das medições, Incerteza da medição.

VALIDAÇÃO DE MÉTODOS E ENSAIOS QUÍMICOS. Definições, Validação de métodos, Características de desempenho dos métodos.

EXPRESSÃO DA MELHOR CAPACIDADE DE MEDIÇÃO

SELEÇÃO E USO DE MATERIAIS DE REFERÊNCIA

ENSAIO DE PROFICIÊNCIA EM LABORATÓRIOS ANALÍTICOS. Protocolo dos programas de ensaios de proficiência, procedimento estatístico para análise dos resultados.

CERTIFICAÇÃO ISO 17025 E ACREDITAÇÃO DE LABORATÓRIOS

METODOLOGIA

Aulas expositivas, aulas práticas em laboratório e de exercícios.

AVALIAÇÃO

Realização de exercícios e seminários, provas escritas, confecção dos relatórios, participação nas aulas teóricas e experimentais com domínio das técnicas e cuidados adotados no laboratório químico.

BIBLIOGRAFIA

1. DQC-CGCRE-003 Orientações sobre calibração e rastreabilidade das medições em laboratórios de calibração e ensaio, INMETRO, 2000.
2. DQC-CGCRE-008 Orientações sobre validação de métodos de ensaios químicos, INMETRO, 2003.
3. DQC-CGCRE-011 Orientações para a expressão da melhor capacidade de medição nos escopos da acreditação de laboratórios de calibração, INMETRO, 2005.
4. DQC-CGCRE-016 Orientações para seleção e uso de materiais de referência, INMETRO, 2005
5. Protocolo Internacional Harmonizado para ensaios de proficiência em laboratórios analíticos (Químicos). International Harmonized Protocol for Proficiency Testing of (Chemical) Analytical Laboratories originalmente impresso em inglês no Journal of AOAC International, AOAC International, Gaithersburg, Maryland, Estados Unidos, Volume 76, N 4, 1993.

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Componente Curricular: QUÍMICA DE PRODUTOS NATURAIS (OPTATIVA)

Carga Horária: 60 horas.

Numero de Créditos: 04

Pré-Requisitos: QUÍMICA ORGÂNICA II

Público-alvo: Bacharelado em Química

OBJETIVO: Estudar as várias classes de produtos naturais, relacionando suas estruturas moleculares às propriedades físicas e, à reatividade química pela compreensão de suas reações.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Resolver problemas que envolvam estruturas, métodos de isolamento, propriedades físicas e químicas dos compostos estudados, através da aplicação dos conceitos teóricos fundamentais envolvidos, construindo assim o desenvolvimento do pensamento científico.

EMENTA /PROGRAMA

Propriedades físico-químicas. Processos extrativos e de purificação de metabólitos primários (carboidratos, lipídeos e proteínas). Metabólitos secundários (terpenos, esteróides, flavonóides, alcalóides, quinonas, cumarinas, etc.). Isolamento, identificação e controle químico.

METODOLOGIA

Aulas expositivas e de exercícios. Apresentação de seminários.

AVALIAÇÃO

Realização de exercícios, provas escritas e participação nas aulas.

BIBLIOGRAFIA

1. DOMINGUEZ, X. A., *Métodos de Investigación Fitoquímica*, Limusa: México: 1973.
2. FINAR, I. L. Organic chemistry: Stereochemistry and the chemistry of natural products. 5th ed. Longman Group: Essex: 1988.
3. GEISSMAN, T. A. (Ed.), *The chemistry of flavonoid compounds*, Macmillan: New York, 1962.
4. GEISSMAN, T. A., CROUT, D. H. G., *Organic chemistry of secondary plant metabolism*, Freeman and Cooper: San Francisco, 1969.
5. IKAN, R., *Natural products: A laboratory guide*, 2nd ed., Academic Press, New York: 1991.
6. MATOS, F. J. A., *Introdução a Fitoquímica Experimental*, 2^a ed. Editora da UFC: Fortaleza, 1997.
7. THOMPSON, R. H. (Ed.), *Chemistry of natural products*. 2.ed. Blackie Academic & Professional: London, 1993.
8. VILELA, E. F.; DELLA LUCIA, T. M. C. (Ed.) *Feromônios de insetos: Biologia, química e aplicação*, 2^a ed., Holos: Ribeirão Preto, 2001.

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Componente Curricular: QUÍMICA DO ESTADO SÓLIDO (OPTATIVA)

Natureza: OPTATIVA

Carga Horária: 60 horas.

Numero de Créditos: 04

Pré-Requisitos: Química Inorgânica

Público-alvo: Bacharelado em Química.

OBJETIVOS: Correlacionar as propriedades físico-químicas dos sólidos cristalinos e amorfos com a sua estrutura. Aplicar os conceitos de periodicidade e simetria à construção das estruturas cristalinas. Mostrar aplicações de diversos tipos de sólidos.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Entender os diversos tipos de interações envolvidas na formação dos sólidos. Entender o conceito de periodicidade no que se refere à construção de estruturas cristalinas. Descrever as propriedades geométricas e de simetria dos grupos e retículos cristalinos. Compreender o conceito de estruturas cristalinas análogas e utilizá-las na descrição de sólidos cristalinos mais complexos. Correlacionar aspectos estruturais de sólidos com as suas propriedades.

EMENTA / PROGRAMA

Estruturas Cristalinas;

Ligação química nos sólidos – teoria de bandas;

Elementos de simetria translacionais: grupos pontuais e grupos espaciais;

Técnicas de difração: raios-X e microscopia eletrônica;

Defeitos e não-estequiometria;

Métodos de síntese: reações no estado sólido, sol-gel; síntese hidrotérmica, reações de intercalação, auto-ordenamento, etc.

Colóides e Superfícies (aspectos fundamentais)

METODOLOGIA

Aulas expositivas e de exercícios, Seminários.

AValiação :

Provas escritas e seminários.

BIBLIOGRAFIA

1. WEST, A.R., *Basic Solid State Chemistry*, 2nd ed., John Wiley & Sons: Chichester, 2002.
2. HUHEEY, J. E., KEITER, E. A, KEITER, R. L., *Inorganic Chemistry - Principles of Structure and Reactivity*, 4th Ed., Harper Collins, New York, 1993.
3. KITTEL, C., *Introdução à Física do Estado Sólido*, 5^a Ed., Editora Guanabara Dois: São Paulo, 2002.

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

Componente Curricular: TERMODINÂMICA ESTATÍSTICA (OPTATIVA)

Carga Horária: 60 horas.

Numero de Créditos: 04

Pré-Requisitos: QUÍMICA QUÂNTICA E ESPECTROSCOPIA

Público-alvo: Bacharelado em Química.

OBJETIVOS: Descrever os conceitos básicos necessários ao uso da termodinâmica estatística na obtenção de propriedades termodinâmicas macroscópicas.

HABILIDADES E COMPETÊNCIAS: Compreender como as propriedades termodinâmicas são obtidas a partir das funções de partição.

EMENTA / PROGRAMA

Generalidades sobre a termodinâmica clássica; Termodinâmica estatística e a conexão entre as propriedades microscópicas e macroscópicas; Configuração dominante & Distribuição de Boltzmann; Função de partição e sua interpretação; Fatoração da Função de Partição e a independência dos diversos movimentos; Densidade de estados & Distribuição de Probabilidades; Exemplos envolvendo o cálculo de funções de partição; O conceito de *Ensemble* e a equivalência entre os *Ensembles*; Cálculo de constantes de Equilíbrio e funções termodinâmicas a partir das funções de partição.

METODOLOGIA

Aulas expositivas.

AVALIAÇÃO :

Provas escritas e seminários.

BIBLIOGRAFIA

1. ATKINS, P. W., DE PAULA, E J., *Físico-Química*, 7ª Edição, Vol. 2, LTC: São Paulo, 2005.
2. MCQUARIE, D. A., *Statistical Thermodynamics*, Harper and Row: New York, 1973.