



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ  
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS  
PROGRAMA DE PÓS – GRADUAÇÃO EM QUÍMICA



- Ementas e Bibliografias das disciplinas ativas do PPGQ/UFPA

1) **ANÁLISE TÉRMICA** (disciplina eletiva)

a) **Código da disciplina:** PPGQI0043

b) **Carga Horária:** 60h

c) **Créditos:** 4

d) **Ementa:** definição, classificação e aplicações. Fundamentos das principais técnicas termoanalíticas: termogravimetria (TG), calorimetria exploratória diferencial (DSC) e análise térmica diferencial (DTA). Fatores que afetam as curvas térmicas. Instrumentação. Técnicas acopladas.

e) **Bibliografia**

1) MOTHÉ, Cheila Gonçalves; AZEVEDO, Aline Damico. **Análise Térmica de Materiais**. São Paulo: IEditora, 2002.

2) HOLLER, F. James *et al.* **Princípios de Análise Instrumental**. 6. ed. Porto Alegre: Bookman, 2009.

2) **ESCRITA, REVISÃO E ÉTICA EM ARTIGOS CIENTÍFICOS** (disciplina obrigatória)

a) **Código da disciplina:** PPGQI0117

b) **Carga Horária:** 60h

c) **Créditos:** 4

d) **Ementa:**

**I- Estruturação de artigos científicos:** Diferentes tipos de artigos científicos; tempos verbais mais adequados em língua inglesa; uso de abreviações; elaboração do título, resumo, introdução, metodologia, resultados e discussão, conclusões, referências; uso de sinônimos, principais bases de dados e como utilizá-las.

**II-Submissão de artigos científicos:** Ética em publicação; principais editoras; cadastramento em diferentes plataformas; fator de impacto; escolha da revista científica para submissão; revistas predatórias; processo de submissão; carta de encaminhamento; função dos editores; resposta aos revisores.

**III-Revisão de artigos científicos:** Plataforma Web of Science; certificação de artigos científicos revisados; integração entre plataformas e revistas para validação de revisão, elaboração da revisão de artigos científicos.

**e) Bibliografia**

- 1) ROSENBERG, Jacob (ed.). **How to write a scientific paper:** advice from the editor. Inglaterra: Createspace Independent Publishing Platform, 2016. 98 p.
- 2) GASTEL, Barbara; DAY, Robert A. **How to write and publish a scientific paper.** Bloomsbury Publishing USA, 2022.
- 3) SANTOS, Izequias Estevam dos. **Manual de métodos e técnicas de pesquisa científica.** Niterói: Impetus, 2015. 363 p.
- 4) BURSZTYN, Marcel; DRUMMOND, José Augusto; SANTOS, Elimar Pinheiro dos. **Como Escrever (E Publicar) Um Trabalho Científico:** dicas para pesquisadores e jovens científicos. Rio de Janeiro: Garamond, 2010. 112 p.
- 5) CUNHA, T. R.; PERUZZO JUNIOR, L.; MEIRELLES, J. M. L. (orgs.). **Ética na pesquisa científica.** v. 1. Curitiba: PUCPRESS, 2018. 74P. (Coleção ética em pesquisa).

**3) FÍSICO-QUÍMICA AVANÇADA** (disciplina eletiva)

- a) **Código da disciplina:** PPGQI0003
- b) **Carga Horária:** 60h
- c) **Créditos:** 4
- d) **Ementa:** Termodinâmica Química: Estado Gasoso (Gás Perfeito e Real); Leis da Termodinâmica; Equilíbrio Químico; Termodinâmica Estatística: Distribuição dos Estados Moleculares; Função de Partição Molecular e Canônica; Funções Termodinâmicas; Aplicações da Termodinâmica Estatística; Cinética Química: Velocidade das Reações; Teoria das

Colisões e do Estado de Transição; Catálise Homogênea e Heterogênea; Mecanismos de Reação.

**e) Bibliografia**

- 1) ATKINS, Peter William; DE PAULA, Julio; KEELER, James. **Physical Chemistry**. 11. ed. Reino Unido: Oxford University Press, 2018. 908 p.
- 2) SILBEY, Robert J.; ALBERTY, Robert A.; BAWENDI, Mounji G. **Physical Chemistry**. 4. ed. USA: John Wiley & Sons, Inc., 2024. 960 p.
- 3) DAVID W. BALL and TOMAS BAER. **Physical Chemistry**, 2nd Edition. Cengage Learning. Stamford, 2015.
- 4) IRA N. LEVINE – **Physical Chemistry**, 6th Edition. McGraw-Hill, Inc. New York, 2009.
- 5) **THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY:**  
<https://pubs.acs.org/toc/jpchax/current>
- 6) **QUÍMICA NOVA:** <http://quimicanova.s bq.org.br/quimicanova.html>

**4) INTRODUÇÃO À MODELAGEM MOLECULAR** (disciplina eletiva)

**a) Código da disciplina:** PPGQI0118

**b) Carga Horária:** 60h

**c) Créditos:** 4

**d) Ementa:** a) Introdução a Pacotes para Química Computacional: Definições de Termos; Tipos de Pacotes Computacionais; Hardware e Software. b) Modelagem Molecular; Mecânica Molecular e Mecânica Quântica: Histórico e Fundamentos; Estratégias de Parametrização; Otimização de Geometria; Campos de Forças. c) Orbitais Atômicos e Moleculares. d) Estrutura Molecular e Eletrônica: Fundamentos da Teoria do Orbital Molecular; Implementações de Métodos Semi-Empíricos e Ab Initio. Superfície de Energia Potencial e Reações Químicas: Aproximação de Born-Oppenheimer; Propriedades Termodinâmicas e Cinéticas; Distribuição de Cargas; Propriedades Espectroscópicas; e) Efeitos de Solvatação: Efeitos da Fase Condensada na Estrutura e Reatividade; Interações Eletrostáticas; Modelos de Solvatação Implícita e Explícita; Ciclos Termodinâmicos.

**e) Bibliografia**

I - **Básica**

- 1) CRAMER, C. J. **Essentials of computational chemistry: theories and models**. John Wiley & Sons Ltd, 2nd ed. 2004.
- 2) MORGON, N. H. e COUTINHO, K. R. **Métodos de química teórica e modelagem molecular**. Editora Livraria da Física, São Paulo, 2007.
- 3) FILATOV, M.; CHOI, C.H.; OLIVUCCI, M. **New Horizons in Computational Chemistry Software** (Topics in Current Chemistry Collections), Springer, 2022.
- 4) LIPKOWITZ, K.; PARRILL, A. L. **Reviews in computational chemistry**. Wiley & Sons Ltd, 2019.

## II - Complementar

- 1) FIELD, M. J. **A Practical Introduction to the Simulation of Molecular Systems**. Cambridge University Press, 2nd ed. 2007.
- 2) HINCHLIFFE, A. **Modelling Molecular Structures**. John Wiley & Sons Ltd, 2nd ed. 2000.
- 3) UL-HAQ, Z.; WILSON A. K. **Frontiers in Computational Chemistry**. Bentham Science Publishers, 2020.

## 5) MECANISMO DE REAÇÕES ORGÂNICAS (disciplina eletiva)

- a) **Código da disciplina:** PPGQI0114
- b) **Carga Horária:** 60h
- c) **Créditos:** 4
- d) **Ementa:** Determinação experimental do mecanismo de reações; Reações de substituição; Reações de adição a ligações duplas carbono-carbono; Reações de eliminação; Reações de adição a ligações duplas carbono-oxigênio; Reações de radicais livres; Reações de rearranjo; Reações de oxidação.
- e) **Bibliografia**
  - 1) CAREY, F. A.; SUNDBERG, R. J. **Advanced Organic Chemistry**. 4<sup>o</sup> ed. Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2001.
  - 2) CLAYDEN, J.; GREEVES, N.; WARREN, S.; WOTHERS, P. **Organic Chemistry**. 2<sup>o</sup> ed. Oxford University Press, 2001.
  - 3) MARCH, J.; SMITH, M. B. **Advanced Organic Chemistry**. 5<sup>o</sup> ed. Wiley, 2001.

4) **Artigos relacionados com as linhas de pesquisa do PPGQ publicados em revistas indexadas no QUALIS da CAPES.**

6) **METODOS CROMATOGRÁFICOS** (disciplina eletiva)

a) **Código da disciplina:** PPGQI0042

b) **Carga Horária:** 60h

c) **Créditos:** 4

d) **Ementa:** Princípios básicas de cromatografia. Cromatografia líquida de alta eficiência.

e) **Bibliografia**

1) SNYDER, Lloyd R.; KIRKLAND, Joseph J.; GLAJCH, Joseph L. **Practical HPLC method development**. 2º ed., John Wiley & Sons, 1997. 800 p.

2) SNYDER, L. R.; DOLAN, J. W. **Initial experiments in high-performance liquid chromatographic method development I. Use of a starting gradient run**. Journal of Chromatography A, v. 721, n. 1, p. 3-14, 1996.

3) LANÇAS, Fernando Mauro. **Validação de métodos cromatográficos de análise**. São Carlos: RiMa, 2004.

4) COLLINS, Carol H.; BRAGA, Gilberto L.; BONATO, Pierina S (Orgs.). **Fundamentos de Cromatografia**. Campinas, SP: Editora da Unicamp, 2006.

7) **MÉTODOS DE SEPARAÇÃO EM QUÍMICA ANALÍTICA** (disciplina eletiva)

a) **Código da disciplina:** PPGQI0112

b) **Carga Horária:** 60h

c) **Créditos:** 4

d) **Ementa:** Fundamentos, estado da arte, instrumentação, parâmetros importantes, modelos matemáticos, interpretações físicas, métodos e aplicações de separações em cromatografia moderna. Será visto cromatografia gasosa, líquida, fluído supercrítico e eletroforese capilar. Conteúdo: 1 Introdução à separações Introdução a ciência de separações. Extração líquido-líquido, extração em fase sólida, dispositivos de troca iônica. Fundamentos de cromatografia Teoria do

número de partos teóricos e teoria cinética da cromatografia. Avaliação de parâmetros de desempenho para separações, otimização de técnicas cromatográficas. Cromatografia gasosa Fundamentos da técnica, fases de arraste, instrumentação, desde tipos de colunas até detectores empregados, aplicações, otimização de separações em cromatografia gasosa, exemplos práticos e aula prática em cromatógrafo Gasoso. Cromatografia Líquida Será dada ênfase a cromatografia líquida de alta eficiência- HPLC, modos normal e reversa, eluição isocrática, gradiente, tipos de coluna, otimização, fases móvel e estacionária, instrumentação, desde tipos de colunas até detectores empregados, aplicações, otimização de separações em cromatografia líquida, exemplos práticos e aula prática em cromatógrafo líquido. 5- Separação por eletroforese capilar Princípios, modelos matemáticos, parâmetros físicos, eletroforese por zona. Fundamentos da técnica, eletrólitos fases de arraste, instrumentação, desde tipos de colunas até detectores empregados, aplicações, otimização de separações em cromatografia gasosa, exemplos práticos. 6- Separação com fluido supercrítico Fundamentos básicos de funcionamento, instrumentação, aparatos, aplicações e exemplos práticos. Modos de avaliação Provas teóricas, práticas, seminários em grupo, resenha de artigos, capítulo de livros.

**e) Bibliografia**

- 1) COLLINS, C. H.; BRAGA, G.L., BONATO, P.S. **Fundamentos de cromatografia**. Campinas: Editora da UNICAMP, 2006.
- 2) HAGE, David S. Affinity chromatography: a review of clinical applications. **Clinical chemistry**, v. 45, n. 5, p. 593-615, 1999.
- 3) STEVENS, Timothy S.; DAVIS, James C.; SMALL, Hamish. **Hollow fiber ion-exchange suppressor for ion chromatography**. Analytical Chemistry, v. 53, n. 9, p. 1488-1492, 1981.
- 4) HANAOKA, Yuzuru et al. **Ion chromatography with an ion-exchange membrane suppressor**. Journal of Chromatography A, v. 239, p. 537-548, 1982.
- 5) SAARI-NORDHAUS, Raaidah; ANDERSON JR, James M. **Recent advances in ion chromatography suppressor improve anion**

**separation and detection.** Journal of Chromatography A, v. 956, n. 1-2, p. 15-22, 2002.

- 6) ERICKSON, Britt E. **Product Review: ICPMS--Beyond quadrupole.** Analytical Chemistry, v. 71, n. 23, p. 811A-815A, 1999.
- 7) HARRIS, D. **Análise Química Quantitativa.** 8ª Edição. LTC--Livros Técnicos e Científicos Editora Lda. 2012.
- 8) SKOOG, D. A, WEST, D. M., HOLLER, F. J., Crouch, S. R. **Fundamentos de Química Analítica.** Editora Thomson, tradução da 8ª edição, 2006.
- 9) SKOOG, Douglas A. et al. **Princípios de análise instrumental.** 5º ed., Bookman: 2002.
- 10) DOS SANTOS, Vagner Bezerra et al. **Amphetamine and derivatives in natural weight loss pills and dietary supplements by capillary electrophoresis-tandem mass spectrometry.** Journal of Chromatography B, v. 1038, p. 19-25, 2016.
- 11) DANIEL, Daniela et al. **Determination of biogenic amines in beer and wine by capillary electrophoresis-tandem mass spectrometry.** Journal of Chromatography A, v. 1416, p. 121-128, 2015.
- 12) CARRILHO, Emanuel; TAVARES, Maria Cecília H.; LANÇAS, Fernando M. **Fluidos supercríticos em química analítica. I. Cromatografia com fluido supercrítico: conceitos termodinâmicos.** Química Nova, v. 24, p. 509-515, 2001.
- 13) CARRILHO, E.; TAVARES, M. C. H., LANÇAS, F. M. **fluidos supercríticos em química analítica II. cromatografia com fluido supercrítico: instrumentação.** Quim. Nova, v. 26, n. 5, p. 687-693, 2003.
- 14) HONG, Paula; KOZA, Stephan; BOUVIER, Edouard SP. **A review size-exclusion chromatography for the analysis of protein biotherapeutics and their aggregates.** Journal of liquid chromatography & related technologies, v. 35, n. 20, p. 2923-2950, 2012.

8) **MÉTODOS FÍSICOS DE ANÁLISE ORGÂNICA** (disciplina eletiva)

a) **Código da disciplina:** PPGQI0005

**b) Carga Horária:** 60h

**c) Créditos:** 4

**d) Ementa:** Introdução ao uso de métodos espectroscópicos e espectrométricos na identificação estrutural de compostos orgânicos:

I - Infravermelho;

II - Ultravioleta-visível e fluorescência;

III - Noções de espectrometria de Massas;

IV - Ressonância Magnética Nuclear 1D e 2D (quando aplicável);

V - Aplicação conjunta destas técnicas de análise.

**e) Bibliografia**

1) SILVERSTEIN, R.M.; WEBSTER, F.X.; KIEMLE, D. **Spectrometric Identification of Organic Compounds**. 8th Edition. John Wiley & Sons, N.Y., EUA. 2014.

2) PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S. **Introduction to Spectroscopy**, 5th. Ed. Thomson Learning, Inc. USA. 2014.

3) BREITMAIER, Eberhard. **Structure elucidation by NMR in organic chemistry: a practical guide**. John Wiley & Sons, 2002.

## 9) METODOS ÓTICOS APLICADOS À DETERMINAÇÃO DE TRAÇOS (disciplina eletiva)

**a) Código da disciplina:** PPGQI0043

**b) Carga Horária:** 60h

**c) Créditos:** 4

**d) Ementa:** 1. Introdução à determinação de traços. 2. Espectrometria de absorção atômica com chama. 3. Espectrometria de absorção atômica em forno de grafite (GFAAS). 4. Espectrometria de absorção atômica por geração de hidretos (HG-AAS). 5. Espectrometria de absorção atômica por vapor frio (CV-AAS). 6. Espectrometria de absorção atômica por amalgamação e decomposição térmica (TDAAAS). 7. Espectrometria de emissão óptica com plasma induzido por micro-ondas (MIP OES). 8. Espectrometria de emissão óptica com plasma induzido por micro-ondas (ICP OES). 9. Espectrometria de massa com plasma acoplado indutivamente (ICP-MS). 10. Técnicas hífenadas. 11. Especificação química.

**e) Bibliografia**

## I - Básica

- 1) HOWARD, A. G., STATHAM, P. J. **Inorganic Trace Analysis: Philosophy and Practice**. Chichester, John Wiley & Sons, 1993.
- 2) VANDECASTEELE, Carlo; BLOCK, Chantal B. **Modern methods for trace element determination**. John Wiley & Sons, 1997.
- 3) CORNELIS, Rita *et al.* **Handbook of Elemental Speciation. Techniques and Methodology**. John Wiley, 2003.

## II - Complementar

- 1) KRUG, J. F.; NÓBREGA, J. A.; OLIVEIRA, P. V. Apostila de Espectrometria Atômica-Parte 1. **Fundamentos e atomização com chama**. ESALQ/USP, 2006.
- 2) GINÉ, M. F. **Espectrometria de emissão atômica com plasma acoplado indutivamente (ICPAES)**. Piracicaba-SP, 1998.
- 3) CORNELIS, Rita *et al.* **Handbook of Elemental Speciation. Techniques and Methodology**. John Wiley, 2003.
- 4) FONTOURA, B. M. *et al.* **Is MIP-OES a suitable alternative to ICP-OES for trace element analysis?** Journal of Analytical Atomic Spectrometry, v. 37, p. 966-984, 2022.
- 5) **Notas técnicas usando o analisador direto de mercúrio.**

## **10) MODELAGEM COMPUTACIONAL DE REAÇÕES ENZIMÁTICAS**

(disciplina eletiva)

**a) Código da disciplina:** PPGQI0116

**b) Carga Horária:** 60h

**c) Créditos:** 4

**d) Ementa:** Introdução à Catálise Enzimática. Representação Química de Modelos Moleculares. Fundamentos de Mecânica Molecular (MM) e Mecânica Quântica (MQ). Algoritmos de Otimização e Dinâmica Molecular. Potenciais Híbridos de MM e MQ. Superfície de Energia Potencial. Potencial de Força Média. Energia Livre de Ativação e Reacional. Mecanismo Enzimático e o Desenho de Fármacos.

**e) Bibliografia**

## I - Básica

- 1) CRAMER, C. J. **Essentials of computational chemistry: theories and models**. John Wiley & Sons Ltd, 2nd ed. 2004.
- 2) FIELD, M. J. **A Practical Introduction to the Simulation of Molecular Systems**. Cambridge University Press, 2nd ed. 2007.
- 3) COPELAND, R. A. **Enzymes: A Practical Introduction to Structure, Mechanism and Data Analysis**. Wiley & Sons Ltd, 2nd ed. 2000.
- 4) LIPKOWITZ, K.; PARRILL, A. L. **Reviews in computational chemistry**. Wiley & Sons Ltd, 2019.

## II - Complementar

- 1) LEVINE, I. N. **Quantum Chemistry**. 7th Edition, Pearson Education: 2013.
- 2) MORGON, N. H.; COUTINHO, K. R. **Métodos de química teórica e modelagem molecular**. Editora Livraria da Física, São Paulo, 2007.
- 3) FERSHT, A. R. **Structure and Mechanism in Protein Science. A Guide to Enzyme Catalysis and Protein Folding**. New York, 1999.

## 11) POLUENTES INORGÂNICOS (disciplina eletiva)

- a) **Código da disciplina:** PPGQI0044
- b) **Carga Horária:** 60h
- c) **Créditos:** 4
- d) **Ementa:** A disciplina Poluentes inorgânicos explora a relação entre a química dos metais tóxicos e o meio ambiente do ponto de vista químico. Uma nova abordagem e estrutura didática alternativa tornam a aprendizagem mais flexível. A disciplina aborda novos problemas ambientais na perspectiva mundial como a contaminação do ambiente pelo mercúrio, a contaminação do ambiente pelos resíduos tóxicos e tenta relacioná-los com os problemas regionais. A disciplina foi estruturada em três partes: Substâncias tóxicas, resíduos tóxicos e poluição química. Os capítulos serão abordados de forma individual e independente sem perder de vista o contexto geral. A bibliografia recomendada abrange os tópicos propostos e a bibliografia complementar aborda alguns assuntos de suma importância para a química ambiental e que requerem um estudo mais específico de seu conteúdo.

**e) Bibliografia**

- 1) BAIRD, Colin; CANN, Michael. **Química Ambiental**. 4º edição, Bookman Companhia Editora Ltda., 2011. 844 p.
- 2) GIRARD, James E. **Princípios de Química Ambiental**. 2º edição, LTC, 2013. 438 p.
- 3) SOUZA, Mariana. **Processos Inorgânicos**. 1º edição, SYNERGIA, 2012. 252 p.
- 4) DUARTE, Armando et al. **Ecotoxicologia e remoção de poluentes**. 9º edição, Instituto Piaget, 2002. 252 p.
- 5) PLANT, JANE *et al.* **Pollutants, Human Health and the Environment: A Risk Based Approach**. 2º edição, Wiley, 2013.

**12) PREPARO DE AMOSTRAS FUNDAMENTOS E APLICAÇÕES** (disciplina eletiva)

**a) Código da disciplina:** PPGQI0037

**b) Carga Horária:** 60h

**c) Créditos:** 4

**d) Ementa:** 1. Introdução 2. Tratamentos preliminares da amostra 3. Decomposição e solubilização de sólidos inorgânicos 4. Decomposição de materiais orgânicos 5. Decomposição por via úmida 6. Decomposição pelo método de Kjeldahl 7. Decomposição pelo método de Carius 8. Decomposição por via úmida em sistemas fechados de alta pressão 9. Digestão de amostras assistida por micro-ondas 10. Instrumentação para digestão com micro-ondas 11. Aplicações e tendências em digestões com micro-ondas 12. Medidas de segurança no uso de micro-ondas

**e) Bibliografia**

**I - Básica**

- 1) KRUG, F. J.; ROCHA, F. R. P. **Métodos de preparo de amostras para análise elementar**. 1ª Edição revisada, Piracicaba, 2014.
- 2) KINGSTON, Howard M.; HASWELL, Stephen J. **Microwave-Enhanced Chemistry: Fundamentals, sample preparation and applications**. Washington DC, 1997.

**I - Bibliografia complementar**

- 1) ROCHA, D. L. *et al.* **Greening sample preparation in inorganic analysis**. TrAC. Trends in Analytical Chemistry (Regular ed.), Vol. 45, 2013, p. 79-92.
- 2) KORN, Maria das Graças A. *et al.* **Sample Preparation for the Determination of Metals in Food Samples Using Spectroanalytical Methods-A Review**. Applied spectroscopy reviews, Vol.43 (2), 2008, p.67-92.
- 3) AMARAL, Clarice D.B.; NÓBREGA, Joaquim A.; NOGUEIRA, Ana R.A. **Sample preparation for arsenic speciation in terrestrial plants: A review**. Talanta (Oxford), Vol.115, 2013, p. 291-299.

### 13) QUÍMICA AMBIENTAL (disciplina eletiva)

- a) **Código da disciplina:** PPGQI0040
- b) **Carga Horária:** 60h
- c) **Créditos:** 4
- d) **Ementa:** A atmosfera: composição, poluentes comuns do ar, suas fontes e as transformações do ambiente. A hidrosfera: o ciclo hidrológico e a poluição. A litosfera: composição dos solos e rochas e a poluição. A biosfera: sua natureza e as transformações do ambiente. Os alimentos: sua composição, os preservativos e as transformações do ambiente.
- e) **Bibliografia**
  - 1) BOCKRIS, J. O.'M. **Environmental chemistry**. Springer US, 1977.

### 14) QUÍMICA ANALÍTICA AVANÇADA (disciplina eletiva)

- a) **Código da disciplina:** PPGQI0002
- b) **Carga Horária:** 60h
- c) **Créditos:** 4
- d) **Ementa:** Estatística aplicada à Química Analítica. Equilíbrio químico em sistemas ideais e não ideais. Métodos matemáticos usados no cálculo do equilíbrio. Representação gráfica do equilíbrio químico. Processos de dissolução e precipitação. Teoria das titulações e precipitação
- e) **Bibliografia**
  - 1) BUTLER, J. N. **Ionic Equilibrium: A Mathematical Approach – Addison**. Wesley Publishing Company, 1964.

- 2) MONTUENGA, C. **Formacion de complejos en Química Analítica**, Editorial Alhambra, S.A, 1979.
- 3) ROSSOTTI, F.J.C.; ROSSOTTI, H. **The Determination of Stability Constants and Other Equilibrium Constants in Solution.** McGraw. Hill Book Company, Inc 1961.
- 4) LAITINEN, H.A.; HARRIS, W.E. **Chemical Analysis an Advanced Text and Reference**. 2º ed. McGraw - Hill series in Advanced Chemistry, 1973.
- 5) KOLTHOFF, S.M., SANDELL, E.B., MEEHEN, E. J. **Análises Químico Quantitativo**. Libreria y Editoreal Nigar , Buenos Aires, 1972.
- 6) ECKSCHLAGER, K. **Error Measurements and Results in Chemical Analysis**, Van Nostrand - Reinhold, 1972.

#### 15) QUÍMICA BIO-ORGÂNICA (disciplina eletiva)

- a) **Código da disciplina:** PPGQI0011
- b) **Carga Horária:** 60h
- c) **Créditos:** 4
- d) **Ementa:** Processos metabólicos primários e secundários. Caminho acetato: ácidos graxos e policetídeos. Caminho Mevalonato: Terpenóides e esteróides. Caminho chiquimato: aminoácidos aromáticos e fenilpropanóides. Alcalóides: derivados dos aminoácidos alifáticos e dos aminoácidos aromáticos.
- e) **Bibliografia**
  - 1) DEWICK, P.M. **Medicinal Natural Products. A Biosynthetic Approach**. John Willey & Sons, Chichester, 1997.
  - 2) MANN, J. **Chemical Aspects of Biosynthesis**. Oxford University Press Inc., New York, 1994.
  - 3) MANN, J. **Secondary Metabolism**. 2nd ed., Oxford University Press Inc., New York, 1987.

#### 16) QUÍMICA INORGÂNICA AVANÇADA (disciplina eletiva)

- a) **Código da disciplina:** PPGQI0001
- b) **Carga Horária:** 60h
- c) **Créditos:** 4

d) **Ementa:** Estrutura atômica. Orbitais moleculares. Estado sólido. Reações ácido-base. Diagrama de Potenciais e Aplicação. Compostos de Coordenação. Bioinorgânica.

e) **Bibliografia**

- 1) SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W. **Inorganic Chemistry**. Oxford University Press, 1999.
- 2) HUHHEY, J.E; KEITER, E.A.; KEITER, R. L. **Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity**. HarperCollins College Publishers, 1993.
- 3) DOUGLAS, B.; MCDANIEL, D.; ALEXANDER, J. **Concepts and Models of Inorganic Chemistry**. John Wiley & Sons, Inc., 1999.
- 4) COTTON, F. A.; WILKINSON, G.; MURILLO, C.A.; BOCHMANN, M. **Advanced Inorganic Chemistry**. John Wiley & Sons, Inc., 1999.

17) **QUÍMICA ORGÂNICA AVANÇADA** (disciplina eletiva)

a) **Código da disciplina:** PPGQI0004

b) **Carga Horária:** 60h

c) **Créditos:** 4

d) **Ementa:** Ligações Químicas e Teoria Estrutural; Aromaticidade; Reatividade e Estrutura; Estereoquímica e Análise Conformacional; Ácidos e Bases; Os intermediários reativos e as regras de Woodward-Hoffmann.

e) **Bibliografia**

- 1) MARCH, J.; SMITH, M.B. **March's Advanced Organic Chemistry** 5a. ed., John Wiley & Sons Inc. 2001.
- 2) CAREY, F.A.; SUNDBERG, R.J. **Advanced Organic Chemistry**. 4a. ed. Plenum Press, 2000.

18) **QUIMIOMETRIA** (disciplina eletiva)

a) **Código da disciplina:** PPGQI0026

b) **Carga Horária:** 60h

c) **Créditos:** 4

d) **Ementa:** Medidas de tendência central e medidas de dispersão. Intervalos de confiança. Testes de significância. ANOVA. Regressão linear por

mínimos quadrados. Análise multivariada. Introdução ao programa estatística. Análise estatística usando o programa estatística: média; desvio padrão; erros; intervalos de confiança; testes de significância; ANOVA; regressão linear; análise hierárquica de agrupamento (AHA) e análise de componentes principais (ACP). Estudos de casos: tratamento dos resultados experimentais obtidos nos laboratórios de química e em artigos da área. Construção de Modelos de Calibração: Regressão por Componentes Principais (PCR) e Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS). Construção de Modelos de Classificação (Reconhecimento de Padrões): KNN e SIMCA.

## e) Bibliografia

### I - Básica

- 1) FERREIRA, M.M.C. **Quimiometria: Conceitos, Métodos e Aplicações**. Editora da Unicamp, 2015.
- 2) BEEBE, K.R.; PELL, R.J., SEASHOLTZ, M.B. **Chemometrics A Practical Guide**. John Wiley & Sons, 1998.
- 3) BRERETON, R. G. **Applied Chemometrics for Scientists**. Wiley & Sons, 2007.

### II - Complementar

- 1) FERREIRA, M.M.C.; ANTUNES, A.M., MELGO, M.S., VOLPE, P. L. O. **Quimiometria I: calibração multivariada, um tutorial**. Química Nova, vol.22, n.5, p., 1999.
- 2) 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.
- 3) FERREIRA, M.M.C. **QUIMIOMETRIA III – Revisitando a análise exploratória dos dados multivariados**. Química Nova, vol. 45, n.10, p.1251-1264, 2022.

**19) SEMINÁRIOS DIDÁTICOS E DE PESQUISA: SEMINARIOS DE MESTRADO** (disciplina obrigatória)

- a) **Código da disciplina:** PPGQI0021
- b) **Carga Horária:** 15h
- c) **Créditos:** 1
- d) **Ementa:** Conferências e palestras de especialistas locais e convidados, além de seminários de pós-graduandos.
- e) **Bibliografia:** Dependerá do assunto a ser abordado no seminário.

**20) SEMINÁRIOS DIDÁTICOS E DE PESQUISA: SEMINARIOS DE MESTRADO II** (disciplina obrigatória)

- a) **Código da disciplina:** PPGQI0047
- b) **Carga Horária:** 15h
- c) **Créditos:** 1
- d) **Ementa:** Integração científica entre discentes e docentes. Propiciar a prática ao pós-graduando em termos de apresentação oral completa e bem embasada na literatura científica de um tema na área da Química, ampliando sua capacitação para apresentação pública de tema relevante no contexto da comunidade científica.
- e) **Bibliografia:** De acordo com os temas abordados nos seminários, envolvendo, preferencialmente, artigos científicos atuais.