



Plano de Estudos

Escola: Escola de Ciências e Tecnologia

Grau: Mestrado

Curso: Química (cód. 189)

Especialidade Especialização em Química de Materiais

1.º Ano - 1.º Semestre

Especialidade Especialização em Química de Materiais

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI08460	Desenvolvimento de Materiais Porosos Avançados	Química	5	Semestral	130
QUI08461M	Análise e Caracterização de Materiais	Química	5	Semestral	130
QUI08462M	Química Orgânica Avançada	Química	5	Semestral	130
QUI08463M	Separação e Identificação de Compostos Orgânicos	Química	6	Semestral	156
QUI08465M	Modelação e Simulação em Química	Química	5	Semestral	130
MAT07656	Planeamento experimental	Matemática	4	Semestral	104

1.º Ano - 2.º Semestre

Especialidade Especialização em Química de Materiais

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI08468M	Adsorção em Materiais Nanoporosos	Química	5	Semestral	130
QUI08469M	Princípios de Química Verde	Química	2	Semestral	52
QUI08467M	Catálise Homogénea e Heterogénea	Química	5	Semestral	130



1.º Ano - 2.º Semestre

Especialidade Especialização em Química de Materiais

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
Optativas Grupo I, II e III					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
Grupo de Optativas I					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI08470M	Química de Polímeros	Química	6	Semestral	156
QUI08471M	Materiais Avançados de Carbono	Química	6	Semestral	156
QUI08472	Bioaplicações de Materiais Porosos	Química	6	Semestral	156
QUI08473M	Eletroquímica e Corrosão	Química	6	Semestral	156
Grupo de Optativas II					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI08475M	Síntese Orgânica Avançada	Química	6	Semestral	156
QUI08474M	Química Medicinal	Química	6	Semestral	156
QUI08476M	Materiais Orgânicos e Organometálicos Funcionais	Química	6	Semestral	156
QUI08477	Reactividade e Mecanismos	Química	6	Semestral	156
Grupo de Optativas III					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI08478M	Materiais para Eletrónica e Ótica	Química	6	Semestral	156
QUI08479	Propriedades Termofísicas e Termoquímicas	Química	6	Semestral	156
QUI08480M	Química Quântica	Química	6	Semestral	156

2.º Ano - 3.º Semestre

Especialidade Especialização em Química de Materiais

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI08481	Seminário	Química	2	Anual	52
Obrigatórias Alternativas					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
	Dissertação				
	Estágio				

2.º Ano - 4.º Semestre

Especialidade Especialização em Química de Materiais

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
Obrigatórias Alternativas					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
	Dissertação				
	Estágio				



Condições para obtenção do Grau:

Para aprovação na componente curricular é necessário a aprovação (através de avaliação ou creditação) das seguintes unidades curriculares: { \ } newline

{ \ } newline

1^o Semestre: { \ } newline

6 UC obrigatórias num total de 30 Ects { \ } newline

{ \ } newline

2^o Semestre: { \ } newline

3 UC obrigatórias num total de 12 Ects { \ } newline

2 UC optativas do Grupo I num total de 12 Ects { \ } newline

1 UC Optativa dos Grupo I, II ou III num total de 6 ECTS { \ } newline

{ \ } newline

3^o Semestre { \ } newline

1 UC obrigatórias num total de 2 Ects { \ } newline

{ \ } newline

Para obtenção do grau, é necessário também a aprovação na Dissertação ou Relatório de Estágio, com um total de 58 ECTS, no 3.^o e 4.^o Semestre.

Especialidade Especialização em Química Orgânica

1.^o Ano - 1.^o Semestre

Especialidade Especialização em Química Orgânica

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI08460	Desenvolvimento de Materiais Porosos Avançados	Química	5	Semestral	130
QUI08461M	Análise e Caracterização de Materiais	Química	5	Semestral	130
QUI08462M	Química Orgânica Avançada	Química	5	Semestral	130
QUI08463M	Separação e Identificação de Compostos Orgânicos	Química	6	Semestral	156
QUI08465M	Modelação e Simulação em Química	Química	5	Semestral	130
MAT07656	Planeamento experimental	Matemática	4	Semestral	104

1.^o Ano - 2.^o Semestre

Especialidade Especialização em Química Orgânica

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI08468M	Adsorção em Materiais Nanoporosos	Química	5	Semestral	130
QUI08469M	Princípios de Química Verde	Química	2	Semestral	52
QUI08467M	Catálise Homogénea e Heterogénea	Química	5	Semestral	130



1.º Ano - 2.º Semestre

Especialidade Especialização em Química Orgânica

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
Optativas Grupo I, II e III					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
Grupo de Optativas I					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI08474M	Química Medicinal	Química	6	Semestral	156
QUI08475M	Síntese Orgânica Avançada	Química	6	Semestral	156
QUI08476M	Materiais Orgânicos e Organometálicos Funcionais	Química	6	Semestral	156
QUI08477	Reactividade e Mecanismos	Química	6	Semestral	156
Grupo de Optativas II					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI08470M	Química de Polímeros	Química	6	Semestral	156
QUI08471M	Materiais Avançados de Carbono	Química	6	Semestral	156
QUI08472	Bioaplicações de Materiais Porosos	Química	6	Semestral	156
QUI08473M	Eletroquímica e Corrosão	Química	6	Semestral	156
Grupo de Optativas III					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI08478M	Materiais para Eletrónica e Ótica	Química	6	Semestral	156
QUI08479	Propriedades Termofísicas e Termoquímicas	Química	6	Semestral	156
QUI08480M	Química Quântica	Química	6	Semestral	156

2.º Ano - 3.º Semestre

Especialidade Especialização em Química Orgânica

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI08481	Seminário	Química	2	Anual	52
Obrigatórias Alternativas					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
	Dissertação				
	Estágio				

2.º Ano - 4.º Semestre

Especialidade Especialização em Química Orgânica

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
Obrigatórias Alternativas					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
	Dissertação				
	Estágio				



Condições para obtenção do Grau:

Para aprovação na componente curricular é necessário a aprovação (através de avaliação ou creditação) das seguintes unidades curriculares: { \ }newline

{ \ }newline

1^o Semestre: { \ }newline

6 UC obrigatórias num total de 30 Ects { \ }newline

{ \ }newline

2^o Semestre: { \ }newline

3 UC obrigatórias num total de 12 Ects { \ }newline

2 UC optativas do Grupo II num total de 12 Ects { \ }newline

1 UC Optativa do Grupo I, II ou III num total de 6 ECTS { \ }newline

{ \ }newline

3^o Semestre { \ }newline

1 UC obrigatórias num total de 2 Ects { \ }newline

{ \ }newline

Para obtenção do grau, é necessário também a aprovação na Dissertação ou Relatório de Estágio, com um total de 58 ECTS, no 3.^o e 4.^o Semestre. { \ }newline



Condições para obtenção do Grau:

ESPECIALIZAÇÃO EM QUÍMICA DOS MATERIAIS: {}newline

{}newline

Para aprovação na componente curricular é necessário a aprovação (através de avaliação ou creditação) das seguintes unidades curriculares: {}newline

{}newline

1^º Semestre: {}newline

6 UC obrigatórias num total de 30 Ects {}newline

{}newline

2^º Semestre: {}newline

3 UC obrigatórias num total de 12 Ects {}newline

2 UC optativas do Grupo I num total de 12 Ects {}newline

1 UC Optativa dos Grupo I, II ou III num total de 6 ECTS {}newline

{}newline

3^º Semestre: {}newline

1 UC obrigatórias num total de 2 Ects {}newline

{}newline

Para obtenção do grau, é necessário também a aprovação na Dissertação ou Relatório de Estágio, com um total de 58 ECTS, no 3.º e 4.º Semestre. {}newline

{}newline

ESPECIALIZAÇÃO EM QUÍMICA ORGÂNICA: {}newline

{}newline

Para aprovação na componente curricular é necessário a aprovação (através de avaliação ou creditação) das seguintes unidades curriculares: {}newline

{}newline

1^º Semestre: {}newline

6 UC obrigatórias num total de 30 Ects {}newline

{}newline

2^º Semestre: {}newline

3 UC obrigatórias num total de 12 Ects {}newline

2 UC optativas do Grupo II num total de 12 Ects {}newline

1 UC Optativa do Grupo I, II ou III num total de 6 ECTS {}newline

{}newline

3^º Semestre: {}newline



Conteúdos Programáticos

Voltar

Desenvolvimento de Materiais Porosos Avançados (QUI08460)

Componente teórica

Definições e princípios gerais. Principais materiais porosos e sua relevância em contextos científicos e tecnológicos. Método sol-gel. Estrutura porosa, fundamentos de métodos de preparação e influência das condições na porosidade de materiais porosos, nomeadamente: aerogéis; carvões ativados, super-ativados, peneiros moleculares; zeólitos e zeótipos; argilas e argilas com pilares; sílicas, metalossilicatos e materiais de carbono mesoporosos ordenados; materiais híbridos inorgânicos-orgânicos; materiais compósitos porosos. Modificação e funcionalização, para controlo das propriedades dos materiais. Regeneração, importância e métodos, de materiais porosos.

Componente prática

Preparação de materiais microporosos e mesoporosos de vários tipos em diferentes condições e por diferentes métodos. Os materiais serão caracterizados na unidade curricular de Análise e Caracterização de Materiais e na unidade curricular de Adsorção em Materiais Nanoporosos.

Voltar

Análise e Caracterização de Materiais (QUI08461M)

Componente teórica

1. Teoria, sistemas e equipamentos de vácuo. 2. Química superficial. Grupos funcionais, centros coordenativamente insaturados, hidratação e hidroxilação, acidez de Brønsted e de Lewis. Ponto isoeletrico e ponto de carga zero. Método de Boehm. 3. Sistematização de algumas técnicas baseadas em emissão, absorção e dispersão de raios X. Difração de raios X. Espectroscopia de fotoelétrons de raios X. 4. Densidade real, densidade aparente e densidade global de um sólido. Picnometria de hélio e picnometria de mercúrio. 5. Espectroscopias de infravermelho, de Raman e de ressonância magnética nuclear. 6. Microscopia. 7. Termoanálise e microcalorimetria. {\}

Componente prática

Análise e caracterização, por diferentes técnicas, dos materiais preparados na unidade curricular de Desenvolvimento de Materiais Porosos Avançados.



Voltar

Química Orgânica Avançada (QUI08462M)

PROGRAMA

Aulas Teóricas

MÓDULO 1

Intermediários Reactivos em Química Orgânica

1. Resumo das reações
2. Radicais
3. Carbocatiões
4. Carbenos
5. Carbaniões
6. Nitrenos
7. Arinos

MÓDULO 2

Efeitos Estereoelectrónicos em Química Orgânica

1. A teoria das orbitais moleculares de fronteira e reacções Pericíclicas.
Reacções Electrocíclicas, de Cicloadição e Sigmatrópicas.
2. A influência de efeitos estereoelectrónicos na estabilidade e formação de compostos alifáticos cíclicos.
 - (a) O efeito anomérico.
 - (b) Formação de anéis e as regras de Baldwin.

MÓDULO 3

Rearranjos em Química Orgânica

1. Os rearranjos de hidreto e de Wagner-Meerwein.
2. O rearranjo e Pinacol.
3. O rearranjo do ácido benzílico.
4. O rearranjo de Favorskii.
5. O rearranjo de Wolff.
6. Os rearranjos de Hofmann, Curtius, Lossen, Schmidt e Beckman.
7. O rearranjo de Baeyer-Villiger e Dakin.

Nota: Os conhecimentos da matéria dada nesta disciplina serão aprofundados pela resolução de exercícios e problemas em aplicação.



[Voltar](#)

Separação e Identificação de Compostos Orgânicos (QUI08463M)

- Técnicas de separação e isolamento de compostos orgânicos:- Cromatografia em coluna, HPLC e GC.- Fases estacionárias, sistemas de eluição e modos de detecção.- Técnicas hífenadas (LC e GC-MS).- Técnicas espectroscópicas e espectrométricas avançadas para a análise estrutural de compostos orgânicos:- Técnicas mono e bidimensionais de espectrometria de RMN (1H, 13C, DEPT, COSY, HMBC, HMQC, INADEQUATE, NOESY, TOCSY,...).- Espectrometria de RMN de outros núcleos importantes (15N, 19F, 31P e 29Si).- Espectroscopia de Infravermelho (FT-IR).- Espectrometria de Massa

[Voltar](#)

Modelação e Simulação em Química (QUI08465M)

Interações moleculares. Modelos de interação intramolecular e modelos de interação intermolecular. Mecânica molecular e campos de forças. Parametrização de potenciais. Revisões de Mecânica Estatística. Introdução às simulações. Condições de fronteira periódicas. Trajectórias e propriedades. Ergodicidade. Dinâmica molecular. Simulações no ensemble microcanónico. Simulações no ensemble canónico: termóstatos de Nosé-Hoover e de Berendsen. Simulações no ensemble isobárico: baróstatos de Berendsen e de Parrinello-Rahman. Restrições de geometria. Monte Carlo de Metropolis. Ensemble canónico. Ensemble isotérmico-isobárico. Ensemble grande canónico. Ensemble de Gibbs. Amostragens não-Boltzmanneanas. Análise de resultados de simulação. Análise da equilibração das simulações. Funções de distribuição radial. Propriedades mecânicas. Flutuações. Funções de correlação. Propriedades dinâmicas. Simulações quânticas: integrais de caminho e método de Carr-Parrinello.



[Voltar](#)

Planeamento experimental (MAT07656)

Análise de Variância

Generalidades e princípios básicos do delineamento experimental.

Os conceitos de factor, casualização e blocos, efeitos fixos e efeitos aleatórios, delineamentos equilibrados e delineamentos desequilibrados.

Pressupostos da análise de variância.

Teste à normalidade usando métodos gráficos.

Teste de Kolmogorov-Smirnov para a normalidade.

Teste de Levene para a homogeneidade de variâncias.

Análise de Variância (Planeamento de experiências completamente aleatorizado). Modelo de efeitos fixos: delineamentos com 1 factor e 2 factores.

Modelo de efeitos aleatórios: delineamentos com 1 factor e 2 factores.

Modelo misto. Análise de variância dupla com e sem repetições.

Testes de comparações múltiplas de médias: Scheffé, Tukey, Duncan, Dunnett e Bonferroni. Contrastes; contrastes ortogonais. Violação dos pressupostos da ANOVA.

Alternativas não paramétricas à ANOVA: Teste de Kruskal-Wallis (alternativa não paramétrica para a ANOVA simples) e Teste de Friedman (alternativa não paramétrica para a comparação de populações a partir de amostras emparelhadas)

Blocos completos e incompletos. Quadrados latinos Utilização de software estatístico (SPSS e Excel).

Correlação e Regressão linear simples

Correlação linear: coeficiente de correlação de Pearson. Diagrama de dispersão. Tipos de correlação.

O modelo de Regressão linear simples. Hipóteses subjacentes.

Estimadores dos mínimos quadrados para os parâmetros do modelo.

Propriedades dos estimadores dos mínimos quadrados.

Distribuição de probabilidade dos estimadores dos mínimos quadrados.

Intervalos de confiança e testes de hipótese sobre os parâmetros.

Avaliação da qualidade do ajustamento do modelo de regressão linear simples (Teste F da ANOVA e coeficiente de determinação).

Verificação das hipóteses mais importantes do modelo de regressão linear. Análise de Resíduos. Análise gráfica e sua importância no estudo do modelo.

Predição. Intervalos de predição individual. Intervalos de predição em média.

Regressão não linear

Regressão linear simples com transformação de variáveis.

Regressão sem transformação de variáveis.

Utilização de software estatístico (SPSS e Excel).

Regressão linear múltipla.

Modelo de regressão linear múltipla. Hipóteses subjacentes.

Estimação dos parâmetros do modelo.

Propriedades dos estimadores.

Inferências para funções lineares dos parâmetros do modelo.

Significância do modelo de regressão.

Inferência: Intervalos de confiança e testes de hipótese sobre os parâmetros.

Coeficiente de determinação múltipla ajustado.

Teste de Lack-of-Fit (falta de ajustamento).

Análise de resíduos.

Resíduos e autocorrelação teste de Durbin-Watson. Outliers. Leverage.

Multicolinearidade.

Correlações parciais e múltiplas. Testes-F parciais e testes-F sequenciais.

Seleção de variáveis e da melhor equação de regressão. Métodos de procura de um submodelo ajustado aos dados.

Predição. Intervalos de predição individual. Intervalos de predição em média.

Regressão não linear

Regressão linear múltipla com transformação de variáveis.

Regressão sem transformação de variáveis.

Utilização de software estatístico (SPSS e Excel).



[Voltar](#)

Adsorção em Materiais Nanoporosos (QUI08468M)

Componente teórica

1. Conceitos gerais e terminologia. O papel da adsorção em diferentes contextos científicos e tecnológicos. 2. Adsorção a partir da fase gasosa. Mecanismos de adsorção. Isotérmicas de adsorção. Metodologias experimentais. Modelos e teorias, e sua aplicação na caracterização textural. Métodos comparativos. Adsorção de moléculas sonda para avaliação de acidez. Termodinâmica de adsorção. Exemplos de adsorção de diferentes gases e vapores em várias classes de materiais. 3. Adsorção a partir de fase líquida. Metodologias experimentais. Adsorção a partir de soluções diluídas. Classificação e interpretação de isotérmicas. Cinética de adsorção. Exemplos de adsorção de catiões, solutos orgânicos e biomoléculas em diferentes materiais.

Componente prática

Análise quantitativa de isotérmicas de adsorção de nitrogénio, a 77 K, obtidas em materiais diferentes. Os dados serão fornecidos no início permitindo que os alunos apliquem os métodos e consolidem conceitos à medida que irão aprendendo nas aulas teóricas. Determinação experimental de isotérmicas de adsorção, da fase gasosa e a partir de soluções aquosas, por materiais preparados na unidade curricular de Desenvolvimento de Materiais Porosos Avançados.

[Voltar](#)

Princípios de Química Verde (QUI08469M)

Programa

Química e Desenvolvimento Sustentável

Historial e Evolução da QV

Os 12 Princípios da QV

Alfred Nobel - O 'primeiro Químico Verde'?

Fabrico industrial e aplicações tecnológicas da NG e os 12 Princípios da QV

Casos de sucesso em QV

Métricas da QV.

Ciclo de vida e análise do ciclo de vida.

Casos de falsa QV

Os segundos 12 Princípios da QV

Solventes Verdes em Química

Seminários

Organocatalisadores: Ferramentas Versáteis para uma Química mais Verde e Sustentável · Doutor Pedro Barrulas, HERCULES, Universidade de Évora

Enzimas em Química Verde · Prof^ª Paula Robalo | ISEL e Centro de Química Estrutural (IST-UNL)

[Voltar](#)

Catálise Homogénea e Heterogénea (QUI08467M)

Aspectos introdutórios de catálise homogénea e heterogénea. Compostos organometálicos em catálise homogénea: conceitos fundamentais, reacções organometálicas e ciclos catalíticos. Catálise Homogénea na química pesada e química fina. Estudo de alguns casos de destaque.

Catálise heterogénea: desactivação e preparação de catalisadores. Actividade catalítica de materiais porosos. Cinética e Mecanismos da Catálise Heterogénea. Introdução aos Reactores Catalíticos.

Catálise Assimétrica: aspectos introdutórios e reacções importantes. Organocatálise Assimétrica. Aplicação de Enzimas. Catálise Assimétrica Heterogénea.



Voltar

Química de Polímeros (QUI08470M)

Análise histórica e actual da produção industrial de polímeros por tipo e sector de utilização.

Reciclagem de polímeros.

Conceitos fundamentais como monómero, CRU, cadeias simples e duplos, polímeros e pré-polímeros, bloco duros e moles, e ligações cruzadas, entre outros, com referência a polímeros de vinilo, polímeros de vinilideno, poliamidas, aramidas, policarbonato, Kapton, PEEK, poliésteres, poliésteres insaturados e poliuretanos.

Tipos de estrutura (linear, ramificada, cross-linked, em rede, em pente, escadote e estrela); Dendrímeros; Tipos de polietileno; Vulcanização e formação de ligações transversais por via de ligações químicas ou interacções físicas; Cross-linkers; Polimerização em rede; Tipos de copolímero; ABS; Isomeria óptica; Isomeria geométrica; Cristalinidade. Reacções de polimerização; Extensão de polimerização; Definições e determinação experimental de massa molar; Polidispersidade.

Mecanismos de polimerização; Polimerização radicalar; Polimerização catiónica; Polimerização aniónica; Polimerização aniónica viva; Polimerização coordenativa; Polimerização Ziegler-Natta; Polimerização metalocénica; Processos de polimerização em bulk, em solução, em dispersão e em emulsão.

Flexibilidade e força de polímeros; Diagramas tensão-alongamento; Exemplos para termoplásticos, termoendurecidos e elastómeros. Temperatura vítrea; Determinação de T_g e T_m; Estrutura vs. propriedades mecânicas. Comparação de valores de T_g, T_m e densidade de polímeros diferentes.

Tipos de resina; Propriedades gerais de resinas reticuladas; Resinas fenólicas; Síntese, propriedades e aplicações dos tipos Resol e Novolac; Resinas amínicas - síntese, propriedades e aplicações; Fórmica; Contraplacado, aglomerado, MDF e OSB; Resinas epoxídicas - síntese, propriedades e aplicações; Poliuretanos - síntese, propriedades e aplicações; Isocianatos tipos mais comuns, reacções, formação de espumas; Resinas acrílicas - síntese, propriedades e aplicações; Resinas de poliéster insaturado - síntese, propriedades e aplicações; Tintas; Tintas alquídicas.

Polímeros Naturais; Classes; Materiais Lenhocelulósicos; Fibras Celulósicas Naturais; Estrutura de Celulose; Mercerização; Nitrato de celulose; Celulóide; Acetato de Celulose; Éteres de Celulose; Viscose; Celofane; Lyocell; Papel; Composição; Ácido e Básico; Processo Sulfito; Processo Kraft; Amido; Quitina; Quitosana; Lenhina; Processos Hidrolítico e Organosolv; Estrutura Química; Poli(ácido láctico) e Poli(ácido glicólico); Cortiça; Estrutura Morfológica; Estrutura Química, Suberina.

Compósitos; Reforçados com Partículas; Reforçados com Filmes; Reforçados com Fibras; Tipos de Fibra; Fibras de Carbono; Precursores; Produção a partir de PAN e de Piche; Microestrutura e Propriedades de FCs de PAN e de Piche; FCs Crescidas da Fase Vapor (VGCF); Formas de Apresentação de Fibras (Rama, Roving, Tow, Feltro, Tecido, Prépreg, SMC e BMC, etc); Tipos de Compósito de Carbono; CFRP; Compósitos C/C; Compósitos C/Betão; Mecanismo de Fractura de Compósitos. Aplicações em Engenharia Civil.

Elastómeros Vulcanizados; Elastómeros Termoplásticos; Resistência a Temperature, Óleos e Reagentes Químicas; Propriedades Físico-Químicas; Comportamento Elastomérico; 'Termodinâmica' de Estiramento; Polimerização de Dienos; Borracha Natural (NR); SBR; Elastómeros Naturais; Nitrilo; Butilo; Neopreno; EPDM; EVA; Viton e outros polímeros fluorinados; Negro de Fumo; Elastómeros de Silicone; Ionómeros; Nafion. Pega Monstros. Silly Putty. Play Doh.

Construção de Materiais Compósitos & Processamento de Termoplásticos; Processo Manual; Sacos de Vácuo; Spray; Enrolamento; Pultrusão; Compressão; Extrusão; RTM e Variantes; Sopro; Termoformagem. Mostra de vídeos.

Apresentações e discussão de trabalhos.

Voltar

Materiais Avançados de Carbono (QUI08471M)

Programa resumido:

1: Apresentação. 2: Estrutura. 3: Reatividade. 4: Precursores. 5: Caracterização Textural. 6: Caracterização Química. 7: Negro de Fumo. 8: Carvão Ativado. 9: Membranas e Peneiros Moleculares de Carbono. 10: Fibras e Compósitos de Carbono. 11: Carbono em Metalurgia. 12: Fullerenos, Nanotubos e Grafeno. 13: Carbono em Eletroquímica e Catálise. 14: Diamante.

O programa teórico é complementado por um pequeno projeto laboratorial realizado num bloco no meio do semestre e por aulas de problemas.



Voltar

Eletroquímica e Corrosão (QUI08473M)

Tópicos programáticos:

Relevância da Eletroquímica no contexto da Sociedade atual: exposição e conversação acerca de casos comuns e de vanguarda. Eletroquímica no Seio de Fases Condutoras (Revisão): condutores eletrónicos e iónicos; condução eletrónica em condutores e semi-condutores; condução iónica em soluções eletrolíticas e em sais fundidos.

Eletroquímica na Interface de Fases Condutoras: tipos de interfaces, origem e distribuição de carga elétrica na interface das mesmas e diferença de potencial interfacial; processos farádicos e faradaicos em interfaces elétrodo/solução eletrolítica; termodinâmica e cinética eletródica.

Técnicas de caracterização eletroquímica, de espécies químicas e de novos materiais, de processos interfaciais ou não-interfaciais, e de dispositivos eletroquímicos (e.g. baterias, supercondensadores e sensores): a voltametria cíclica, a espectroscopia de impedância eletroquímica, a cronoamperometria, a cronopotenciometria e outras técnicas híbridas.

Conversão/Armazenamento Eletroquímico de Energia Elétrica: princípio de funcionamento, constituição, tipos, características e especificações elétricas de células eletroquímicas primárias, secundárias e de combustível e de supercondensadores.

Eletrossíntese e modificação eletroquímica: produção e transformação eletrolítica de substâncias inorgânicas e orgânicas com interesse industrial e de novos materiais com propriedades multifuncionais e biomiméticas.

Eletrometalurgia: técnicas eletroquímicas de produção de metais, de acabamento metálico e de processamento metálico.

Processos eletroquímicos de tratamento, de reciclagem e de purificação de substâncias e materiais, valiosos ou nocivos: exploração de casos importantes.

Corrosão: importância do fenómeno em vários materiais, com particular relevo nos metálicos; corrosão química versus corrosão eletroquímica; conceitos fundamentais; a corrosão eletroquímica de metais e de ligas em meios aquosos, sua natureza, aspetos termodinâmicos e cinéticos, tipos, formas, testes e métodos de avaliação e medidas de prevenção e controlo.

Leituras recomendadas:

1 - Bibliografia de base:

Allen J. Bard, Larry R. Faulkner, *Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications*, 2nd Ed., John Wiley & Sons, New York, 2001.

D. Pletcher, F.C. Walsh, *Industrial Electrochemistry*, 2nd Ed., Kluwer, New York, 1990.

A.M.O. Brett, C.M.A. Brett, *Eletroquímica Princípios, Métodos e Aplicações*, Livraria Almedina, Coimbra, 1996.

G. Kreysa, Ken-ichiro Ota, R.F. Savinell (Eds.), *Encyclopedia of Applied Electrochemistry*, Springer, New York, 2014.

Pierre R. Roberge, *Corrosion Engineering: Principles and Practice*, McGraw-Hill, New York, 2008.

A. Groisman, *Corrosion for Everybody*, Springer, Dordrecht, 2010.

V. Cicek, *Corrosion Engineering*, Scrivener Publishing - Wiley, Beverly, MA (USA), 2014.

2 - Outros elementos bibliográficos

- Material das aulas, disponibilizado no Moodle.

- Livros e artigos de jornais científicos, que os alunos pesquisarão com a orientação do docente sempre que se justifique.



Voltar

Síntese Orgânica Avançada (QUI08475M)

MÓDULO 1

Métodos de Síntese Orgânica

1. Estratégias e planeamento de síntese
2. Métodos sintéticos para a formação de ligações C-C.
3. Métodos sintéticos para a formação de ligações C=C.
4. Métodos sintéticos para a oxidação.
5. Métodos sintéticos para a redução.
6. Introdução ao uso de grupos protetores.
7. Análise retrosinética.
8. Estudos de caso. A síntese de: Progesterona (W.S. Johnson), Periplanona B (S.L. Schreiber), ICI D1542 (inibidor tromboxane A₂).

MÓDULO 2

Introdução a Síntese Estereosselectiva

1. Compostos quirais, o centro estereogénico, quiralidade central, quiralidade axial e quiralidade planar.
2. Compostos quirais importantes.
3. Reacções estereoespecíficas e estereosselectivas, exemplos. Adição nucleófila a grupos carbonilos, a regra de Cram, a regra de Felkin-Ahn, controlo por quelação. Facés enantiotópicas e diastereotópicas, Ataque por face-Re e por face-Si. O excesso enantiomérico (ee) e excesso diastereomérico (de).
4. Síntese Estereosselectiva.
 - (1) O 'Chiral pool'
 - (2) Síntese Assimétrica
 - (a) reagentes quirais
 - (b) auxiliares quirais
 - (c) catalisadores quirais

Nota: Os conhecimentos da matéria dada nesta disciplina serão aprofundados pela resolução de exercícios/problemas de aplicação.



[Voltar](#)

Química Medicinal (QUI08474M)

PROGRAMA TEÓRICO

Parte A

- 1.1. Introdução à Química Medicinal, sua importância e perspectiva histórica.
- 1.2. Classificação dos fármacos. Nomenclatura dos fármacos.
- 1.3. Ciclo geral dos fármacos no organismo; vias de administração. Farmacocinética: Absorção, Distribuição, Metabolismo e Eliminação dos fármacos; pró-fármacos.
- 1.4. O mecanismo molecular da ação dos fármacos. Recetores.
- 1.5. Relações qualitativas e quantitativas estrutura-atividade: SAR, QSAR, 3DQSAR.
- 1.6. Principais fontes de obtenção de fármacos. Métodos de procura, descoberta e isolamento de novos fármacos; desenvolvimento e produção de novos fármacos.
- 1.7. Estudo de alguns fármacos: estruturas químicas, métodos de obtenção, mecanismos de ação, relação estrutura-atividade, farmacodinâmica, farmacocinética e aplicações.

2. Parte B

- 2.1. As origens das biomoléculas.
- 2.2. Nucleótidos e ácidos nucleicos; funções, incluindo nucleótidos não envolvidos na transferência genética.
- 2.3. A biossíntese, a química e a função da Coenzima A (CoA-SH).
- 2.4. Aminoácidos, péptidos e proteínas. Mecanismos de catálise enzimática do ponto de vista químico. Catálise específica e geral; função de alguns enzimas específicos, mecanismo de inibição de enzimas. Síntese de péptidos.
- 2.5. Introdução aos glúcidos; biossíntese, química e reatividade.

PROGRAMA PRÁTICO

Trabalho prático nº 1 - Síntese do Paracetamol.

Trabalho prático nº 2 - Síntese da Benzocaína.

Trabalho prático nº 3 - Extração e Síntese do Ácido Acetilsalicílico.

[Voltar](#)

Materiais Orgânicos e Organometálicos Funcionais (QUI08476M)

Conceitos básicos de materiais moleculares funcionais: perspectiva dos compostos orgânicos e organometálicos. Métodos de síntese de materiais orgânicos e organometálicos funcionais. Descrição de materiais orgânicos e organometálicos para aplicação em química, física e biologia/medicina. Sensores químicos: compostos macrocíclicos, fullerenos, poliméricos e supramoleculares. Aplicação em física: condutores e comutadores moleculares, LEDs, cristais líquidos, materiais luminescentes, materiais moleculares optoelectrónicos não lineares, materiais fotocromáticos, materiais para painéis solares, sistemas fotovoltaicos e gravação óptica, etc.). Aplicação em biologia e medicina: sensores, ligação a ADN, agentes anti-tumorais, combate a doenças degenerativas, etc.).



[Voltar](#)

Materiais para Eletrónica e Ótica (QUI08478M)

Materiais com propriedades eléctricas e magnéticas importantes em aplicações tecnológicas.

Supercondutores de alta temperatura: estado da arte. Condutores iónicos; as pilhas de combustível: eléctrodos e electrólitos. Aplicações de materiais dieléctricos. Nanomateriais: efeito "nano" nas propriedades dos compostos tradicionais e aplicações em estudo.

Materiais usados na conversão de energia solar, incluindo materiais com actividade fotoelectroquímica e fotocatalítica.

Química e tecnologia dos materiais para optoelectrónica e fotónica. Estado da arte. Dispositivos e materiais para optoelectrónica. Cristais líquidos. Fotocondutores. Materiais luminescentes. Propriedades ópticas não lineares. Transmissão de dados. Gravação óptica-magnética.

[Voltar](#)

Química Quântica (QUI08480M)

Revisões de mecânica quântica. Postulados da mecânica quântica. Teoria de perturbações independente do tempo. O átomo de hidrogénio. O átomo de hélio. Determinantes de Slater. O método de Hartree-Fock. O teorema de Koopman. Correlação electrónica. O spin electrónico e o Princípio de Pauli. Os átomos polieletrónicos. Moléculas diatómicas homonucleares. Métodos ab-initio e teoria do funcional de densidade.

[Voltar](#)

Seminário (QUI08481)

A unidade curricular contempla duas componentes distintas mas complementares. Por um lado, os alunos deverão assistir a palestras, tendo posteriormente de elaborar individualmente um resumo escrito de palestras selecionadas. Os temas das palestras não são fixos, mas estão de acordo com os objetivos do Mestrado em Química.

Por outro lado, na outra componente da unidade curricular cada aluno fará duas apresentações orais individuais. A 1ª será sobre um tema a estabelecer nas primeiras aulas por proposta dos docentes e/ou alunos, e que poderá estar relacionado com o tema da dissertação. A 2ª será sobre resultados obtidos no âmbito do trabalho de dissertação.