



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
QUI8460	Desenvolvimento de Materiais Porosos Avançados	Química	5	Semestral	130
QUI8461M	Análise e Caracterização de Materiais	Química	5	Semestral	130
QUI8462M	Química Orgânica Avançada	Química	5	Semestral	130
QUI8463M	Separação e Identificação de Compostos Orgânicos	Química	6	Semestral	156
QUI8465M	Modelação e Simulação em Química	Química	5	Semestral	130
MAT7656	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
QUI8468M	Adsorção em Materiais Nanoporosos	Química	5	Semestral	130
QUI8469M	Princípios de Química Verde	Química	2	Semestral	52
QUI8467M	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
QUI8470M	Química de Polímeros	Química	6	Semestral	156
QUI8471M	Materiais Avançados de Carbono	Química	6	Semestral	156
QUI8472	Bioaplicações de Materiais Porosos	Química	6	Semestral	156
QUI8473M	Eletroquímica e Corrosão	Química	6	Semestral	156
Grupo de Optativas II					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8475M	Síntese Orgânica Avançada	Química	6	Semestral	156
QUI8474M	Química Medicinal	Química	6	Semestral	156
QUI8476M	Materiais Orgânicos e Organometálicos Funcionais	Química	6	Semestral	156
QUI8477	Reactividade e Mecanismos	Química	6	Semestral	156
Grupo de Optativas III					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8478M	Materiais para Eletrónica e Ótica	Química	6	Semestral	156
QUI8479	Propriedades Termofísicas e Termoquímicas	Química	6	Semestral	156
QUI8480M	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
QUI8481	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

1º Semestre: { \ }newline

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

{ \ }newline

2º 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

3º 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
QUI8460	Desenvolvimento de Materiais Porosos Avançados	Química	5	Semestral	130
QUI8461M	Análise e Caracterização de Materiais	Química	5	Semestral	130
QUI8462M	Química Orgânica Avançada	Química	5	Semestral	130
QUI8463M	Separação e Identificação de Compostos Orgânicos	Química	6	Semestral	156
QUI8465M	Modelação e Simulação em Química	Química	5	Semestral	130
MAT7656	Planeamento experimental	Matemática	4	Semestral	104

1.º Ano - 2.º Semestre

Especialidade Especialização em Química Orgânica

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8468M	Adsorção em Materiais Nanoporosos	Química	5	Semestral	130
QUI8469M	Princípios de Química Verde	Química	2	Semestral	52
QUI8467M	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
QUI8474M	Química Medicinal	Química	6	Semestral	156
QUI8475M	Síntese Orgânica Avançada	Química	6	Semestral	156
QUI8476M	Materiais Orgânicos e Organometálicos Funcionais	Química	6	Semestral	156
QUI8477	Reactividade e Mecanismos	Química	6	Semestral	156
Grupo de Optativas II					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8470M	Química de Polímeros	Química	6	Semestral	156
QUI8471M	Materiais Avançados de Carbono	Química	6	Semestral	156
QUI8472	Bioaplicações de Materiais Porosos	Química	6	Semestral	156
QUI8473M	Eletroquímica e Corrosão	Química	6	Semestral	156
Grupo de Optativas III					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8478M	Materiais para Eletrónica e Ótica	Química	6	Semestral	156
QUI8479	Propriedades Termofísicas e Termoquímicas	Química	6	Semestral	156
QUI8480M	Química Quântica	Química	6	Semestral	156

2.º Ano - 3.º Semestre
Especialidade Especialização em Química Orgânica

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8481	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

1º Semestre: { \ }newline

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

{ \ }newline

2º 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

3º 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

1º Semestre: {\ }newline

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

{\ }newline

2º 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

3º 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

1º Semestre: {\ }newline

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

{\ }newline

2º 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

3º Semestre: {\ }newline



Conteúdos Programáticos

[Voltar](#)

Desenvolvimento de Materiais Porosos Avançados (QUI8460)

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 (QUI8461M)

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 isoelétrico 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. Picnometria de hélio e de mercúrio. Porosimetria 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 (QUI8462M)

Introdução à Teoria das orbitais moleculares de fronteira e reações pericíclicas. Efeitos estereoeletrônicos, e o seu efeito na reatividade e na seletividade de reações, o efeito anomérico e as regras de Baldwin. Introdução a aspetos de estrutura e reatividade em química orgânica, intermediários reativos: preparação e aplicação. Rearranjos e fragmentações. Toda essa matéria será ligada para a síntese de substâncias de elevado valor acrescentado.

[Voltar](#)

Separação e Identificação de Compostos Orgânicos (QUI8463M)

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 (QUI8465M)

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-Boltzmannianas. Análise de resultados de simulação. Análise da equilibração das simulações. Funções de distribuição radial. Propriedades mecânicas. Flutuações. Funções de correlação. Propriedades dinâmicas.

[Voltar](#)

Planeamento experimental (MAT7656)

Método científico e delineamento de experiências.

Modelos de análise de variância de efeitos fixos e de efeitos aleatórios (simples, multifactoriais e mistos).

Comparações múltiplas.

Blocos completos e incompletos. Quadrados latinos.

Alternativas não paramétricas.

Modelo de regressão linear simples e múltipla (estimação, inferência, predição, adequabilidade e validação de pressupostos). Diagnóstico da regressão para observações influentes, outliers, autocorrelação e multicolinearidade. Seleção de modelos.

Regressão não linear.

[Voltar](#)

Adsorção em Materiais Nanoporosos (QUI8468M)

Teórica

1. Conceitos gerais e terminologia. O papel da adsorção em diferentes contextos científicos e tecnológicos. 2. Adsorção a partir da fase gasosa. Metodologias experimentais. Mecanismos de adsorção. Isotérmicas de adsorção. Modelos e teorias, e sua aplicação na caracterização textural. Métodos comparativos. Adsorção de moléculas sonda para avaliação de acidez. Termodinâmica de adsorção. Cinética 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.

Prática

Análise de isotérmicas de adsorção. Determinação experimental de isotérmicas de adsorção da fase gasosa e de soluções aquosas por materiais preparados na unidade curricular de Desenvolvimento de Materiais Porosos Avançados.

[Voltar](#)

Princípios de Química Verde (QUI8469M)

- Introdução. Importância da Química e da Tecnologia Química na Sociedade Moderna:

Vantagens vs Desvantagens.

- Química e Desenvolvimento Sustentável.

- Historial e Evolução da Química Verde.

- Os 12 Princípios da Química Verde.

- Avaliação do Grau de Verdura Química: As Métricas da Química Verde.

- A Química Verde em diferentes vertentes da Química. Casos de sucesso e de 'falsa' Química Verde.

- A Química Verde na vida quotidiana. Casos reais.

- Análise do Ciclo de Vida.

- Os segundos 12 Princípios da Química Verde.

- Materiais nanoporosos como Catalisadores em Química Verde.

- Seminários/palestras sobre temas atuais no âmbito da Química Verde realizados por especialistas convidados.



[Voltar](#)

Catálise Homogénea e Heterogénea (QUI8467M)

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 (QUI8470M)

Teórico: 1: Introdução aos Polímeros. 2: Estrutura Molecular de Polímeros. 3: Mecanismos de Polimerização. 4: Propriedades de Polímeros. 5: Cristais Líquidos. 6: Processamento de Polímeros. 7: Elastómeros e Géis. 8: Polímeros Reticulados. 9: Polímeros Naturais. 10: Sínteses Sol-Gel e Fotoquímicas. 11: Técnicas de Caracterização. 12: Biomateriais. 13: Aplicações nas áreas de Saúde, Energia, Transportes e Construção. 14: Perspetivas Futuras.

Prático: Síntese e caracterização de alguns polímeros.

[Voltar](#)

Materiais Avançados de Carbono (QUI8471M)

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 (QUI8473M)

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).

Eletroquímica na Interface de Fases Condutoras.

Técnicas de caracterização eletroquímica, de espécies químicas e de novos materiais, de processos interfaciais ou não-interfaciais, e de dispositivos eletroquímicos.

Conversão/Armazenamento Eletroquímico de Energia Elétrica: Células eletroquímicas e supercondensadores.

Eletrossíntese e modificação eletroquímica: produção e transformação eletrolítica de substâncias inorgânicas, orgânicas e de novos materiais.

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.

Corrosão: Conceitos fundamentais e relevância do seu estudo.

[Voltar](#)

Síntese Orgânica Avançada (QUI8475M)

Introdução. Métodos modernos em síntese orgânica. Síntese organometálica. Síntese assimétrica. Introdução à análise retro-sintética.

Síntese de alguns fármacos e produtos naturais de destaque. Métodos "verdes" em síntese orgânica (por exemplo, sistemas de solventes alternativos, formas alternativas de ativação de reacções).

Síntese combinatória.



Voltar

Química Medicinal (QUI8474M)

- 1.1. Introdução à Química Medicinal.
- 1.2. Classificação dos fármacos, mecanismos moleculares de ação e relações estrutura-atividade (SAR).
- 1.3. Farmacocinética. Pró-fármacos.
- 1.4. Métodos de procura, descoberta e isolamento de novos fármacos; desenvolvimento e produção de novos fármacos.
- 1.5. Estudo de alguns fármacos importantes: obtenção, estruturas químicas, mecanismos de ação, SARs, metabolismo e aplicações.
 - 2.1. A química das moléculas essenciais nas células.
 - 2.2. Aminoácidos e proteínas; estrutura e funções; reatividade e síntese.
 - 2.3. Glúcidos; classificação, estrutura e reatividade; metabolismo.
 - 2.4. Fosfatos e as macromoléculas derivadas destas unidades: estrutura e reatividade.
 - 2.5. Lípidos; sua variedade estrutural, importância e funções.
 - 2.6. Ácidos nucleicos; funções e informação genética.
 - 2.7. Reconhecimento molecular e comunicação celular.
 - 2.8. Proteínas como catalisadores; mecanismos de catálise enzimática. Enzimas artificiais.

Voltar

Materiais Orgânicos e Organometálicos Funcionais (QUI8476M)

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 (QUI8478M)

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 (QUI8480M)

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 (QUI8481)

A unidade curricular duas componentes distintas mas complementares. Por um lado, os alunos deverão assistir a palestras, tendo posteriormente de elaborar individualmente um resumo escrito. Os temas das palestras não são fixos, e alguns exemplos de palestras convidadas em edições anteriores foram: “Molybdenum (VI) oxo complexes: versatile catalysts for olefin epoxidation”, “Highly active hydroformylation catalysts: development, performance and immobilisation”, “Mag(net)ic Molecules: Synthesis and Application”, “Development and Applications of Biomaterials” e “Silicatos e MOF microporosos e fotoluminescentes”.

Por outro lado, a outra componente da unidade curricular consiste na elaboração de um trabalho individual 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. Cada aluno apresentará o seu trabalho em formato Powerpoint, a que se seguirá um período de discussão.