



Plano de Estudos

Escola: Instituto de Investigação e Formação Avançada

Grau: Programa de Doutoramento

Curso: Química (cód. 629)

1.º Ano - 1.º Semestre

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI12206D	Seminário de Química I	Química	6	Semestral	156

Optativas

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8986D	Síntese e Propriedades de Materiais Nanoporosos	Química	5	Semestral	130
QUI8987D	Metodologias de caracterização de sólidos e superfícies	Química	5	Semestral	130
QUI8988D	Métodos Avançados em Síntese Orgânica	Química	5	Semestral	130
QUI8989D	Mecanismos e Determinação de Estrutura em Química Orgânica	Química	5	Semestral	130
QUI8990D	Métodos Avançados em Química Computacional	Química	5	Semestral	130
QUI8991D	Complementos de Química-Física	Química	5	Semestral	130
QUI8992D	Técnicas Avançadas de Análise e Técnicas Hifenadas	Química	5	Semestral	130
QUI8993D	Técnicas de Microanálise e Análise In-Situ	Química	5	Semestral	130
QUI12207D	Prática docente	Química	5	Semestral	130
Optativa livre					

Tese

1.º Ano - 2.º Semestre

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8983D	Seminário de Química II	Química	6	Semestral	156



1.º Ano - 2.º Semestre

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
Optativas					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8986D	Síntese e Propriedades de Materiais Nanoporosos	Química	5	Semestral	130
QUI8987D	Metodologias de caracterização de sólidos e superfícies	Química	5	Semestral	130
QUI8988D	Métodos Avançados em Síntese Orgânica	Química	5	Semestral	130
QUI8989D	Mecanismos e Determinação de Estrutura em Química Orgânica	Química	5	Semestral	130
QUI8990D	Métodos Avançados em Química Computacional	Química	5	Semestral	130
QUI8991D	Complementos de Química-Física	Química	5	Semestral	130
QUI8992D	Técnicas Avançadas de Análise e Técnicas Hifenadas	Química	5	Semestral	130
QUI8993D	Técnicas de Microanálise e Análise In-Situ	Química	5	Semestral	130
QUI12207D	Prática docente	Química	5	Semestral	130
Optativa livre					
Tese					

2.º Ano - 3.º Semestre

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8984D	Seminário de Química III	Química	4	Anual	104
Tese					

2.º Ano - 4.º Semestre

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
Tese					

3.º Ano - 5.º Semestre

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8985D	Seminário de Química IV	Química	4	Anual	104
Tese					

3.º Ano - 6.º Semestre

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
Tese					

4.º Ano - 7.º Semestre

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
Tese					



4.º Ano - 8.º Semestre

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
Tese					

Condições para obtenção do Grau:

Para conclusão do curso é necessário a aprovação (através de avaliação ou creditação) das seguintes unidades curriculares:

1.º Ano

1.º Semestre:

1 UC obrigatória num total de 6 Ects

2.º Semestre:

1 UC obrigatória num total de 6 Ects

No primeiro ano é necessário frequentar UC optativas conforme quadro de optativas num total de 10 Ects

2.º Ano

1 UC obrigatória num total de 4 Ects

3.º Ano

1 UC obrigatória num total de 4 Ects

Para obtenção do grau, é necessário também a aprovação na Tese com um total de 210 ECTS decorrente no 1.º, 2.º, 3.º e 4.º Ano

Conteúdos Programáticos

Voltar

Seminário de Química I (QUI12206D)

Seminário de Química I envolve a aquisição de experiência numa técnica (ou sequência de técnicas) nova para cada estudante e com complexidade suficiente, a elaboração de uma monografia sobre os princípios da técnica e resultados obtidos, e sua apresentação oral e discussão públicas.

Os temas não são fixos, mas cada tema é adaptado às necessidades particulares de cada estudante e carece da aprovação prévia do júri. Deverá estar relacionado com o tema de tese e deverá ser relevante tendo em conta os objectivos e as competências que se pretende aprofundar com o Programa Doutoral em Química. A monografia deverá incluir resultados obtidos pelo estudante ou obtidos em amostras sintetizadas pelo estudante e com a análise dos resultados realizada pelo estudante. Poderá também incluir resultados recolhidos de publicações.

Adicionalmente, os estudantes têm de assistir a palestras científicas organizadas pela equipa docente da unidade curricular e participar no debate, e poderão também realizar cursos breves.

Voltar

Síntese e Propriedades de Materiais Nanoporosos (QUI8986D)

Componente teórica

Definições e princípios gerais. Principais materiais microporosos e mesoporosos 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. Estes materiais são caracterizados na unidade curricular de Metodologias de Caracterização de Sólidos e Superfícies.



Voltar

Metodologias de caracterização de sólidos e superf... (QUI8987D)

Componente teórica

Teoria, sistemas e equipamento de vácuo. Densidade real, aparente e global. Picnometria de hélio e porosimetria de mercúrio. Grupos funcionais, insaturação coordenativa, hidroxilação, acidez de Brønsted e de Lewis. Ponto isoelétrico e ponto de carga zero. Métodos não instrumentais para quantificação de centros superficiais. Microscopias (SEM, TEM, AFM, SFM). Técnicas envolvendo raios X (XRD, XRF, EDS, XANES, EXAFS, XPS, SAXS). Espectroscopias vibracionais (FTIR, Raman) e NMR. Termoanálise e microcalorimetria (TGA, DTG, TPD, DTA, DSC, STA e calorimetria de Calvet).

Componente prática

Análise e caracterização por diferentes técnicas dos materiais preparados na unidade curricular de Síntese e Propriedades de Materiais Nanoporosos.

Voltar

Métodos Avançados em Síntese Orgânica (QUI8988D)

Metodologias avançadas em síntese orgânica, incluindo uma análise integrada de casos de estudo. Aplicação de compostos organometálicos em síntese orgânica. Análise retrosintética e estratégia sintética para alguns compostos chave. Síntese de alguns fármacos e produtos naturais de destaque. Métodos para a síntese de compostos heterocíclicos. Química verde e métodos sustentáveis.

Voltar

Mecanismos e Determinação de Estrutura em Química ... (QUI8989D)

Reações pericíclicas avançadas - a reação de Diels-Alder tipo inverso e a reação de hetero-Diels-Alder, reações quelotrópicas e a reação ene. O efeito da conformação na reatividade. A equação de Hammett e o postulado de Hammond. Investigação de mecanismos: estudos de cinética, o efeito isotópico de deutério, deteção de intermediários (IV, RMN, espectrometria de massa e ressonância de spin eletrónico (esr)). Compostos alicíclicos - estabilidade, reatividade e síntese.

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). Espectrometria de Massa.

Voltar

Métodos Avançados em Química Computacional (QUI8990D)

Introdução à computação paralela e diferentes tipos de arquiteturas paralelas (taxonomia de Flynn). Identificação de paralelismo num algoritmo. Distribuição de carga. Paralelismo de dados (F95 e OpenMP). "Message Passing" (MPI). "Task farms".

Química Quântica: Métodos de Hückel, semi-empíricos e ab initio. Teoria do funcional de densidade.

Dinâmica Quântica: Evolução temporal de um sistema quântico. Teoria de perturbações dependente do tempo. Teoria do funcional de densidade dependente do tempo. Transições electrónicas.

Simulação molecular: Dinâmica molecular. Simulações nos ensembles microcanónico, canónico (termóstatos de Nosé-Hoover e de Berendsen) e isobárico (baróstatos de Berendsen e de Parrinello-Rahman). Restrições de geometria. Monte Carlo de Metropolis.

Ensemble canónico, isotérmico-isobárico, grande canónico e de Gibbs. Amostragens não-Boltzmanneanas. Teoria de perturbação termodinâmica. Método de integração termodinâmica. Determinação de energias livres.



Voltar

Complementos de Química-Física (QUI8991D)

Bloco comum

Mecânica estatística

Ensembles. Ensembles generalizados. Sistemas de partículas não interagentes. Modelo de Ising, teoria do campo médio e teoria do grupo de renormalização.

2 dos 3 blocos seguintes

Líquidos

Forças e potenciais intermoleculares. Função de distribuição radial. Correlação de orientação molecular. Auto-organização. Teorias de líquidos e soluções: de rede, das células e do campo médio, de perturbações e teorias baseadas em segmentos moleculares. Diagramas de fases a altas pressões.

Termodinâmica experimental

Densidades. Relações PVT. Equações de estado. Equilíbrio líquido-vapor. Pressões de vapor. Funções de excesso. Coeficientes de actividade. Viscosidade de líquidos. Difusão. Capacidades caloríficas.

Técnicas biofísicas

Estrutura e função de moléculas e biosistemas. Técnicas usadas em biofísica: espectroscopia óptica, ressonância magnética, técnicas de dispersão (de luz) e difracção, calorimetria, microscopia e técnicas computacionais.

Voltar

Técnicas Avançadas de Análise e Técnicas Hifenadas (QUI8992D)

Preparação de amostra e análise cromatográfica

Métodos de concentração de analitos em diferentes tipos de amostra. Revisão dos métodos cromatográficos. Desenvolvimentos recentes: cromatografia líquida a alta temperatura, novas colunas, ultrahigh pressure liquid chromatography, cromatografia multidimensional. Detectores de massa, modos de ionização e hifenação com técnicas cromatográficas.

Métodos electroquímicos

Métodos não-interfaciais (condutimetria), métodos interfaciais estáticos (potenciometria) e dinâmicos (voltametria, cronamperometria, cronocoulometria, cronopotenciometria, titulação coulométrica, espectroscopia de impedância electroquímica, microbalança de cristal de quartzo electroquímica, espectrometria de massa electroquímica, microscopias de túnel de varrimento electroquímico, de força atómica electroquímica, e electroquímica de varrimento, espectroelectroquímica, fotoelectroquímica e electroquímiluminescência). Novos sensores electroquímicos.

Voltar

Técnicas de Microanálise e Análise In-Situ (QUI8993D)

1. Contextualização: a importância e necessidade de técnicas micro-analíticas e de análise in-situ em Química, suas aplicações e aspectos históricos.

2. Técnicas de micro-análise

2.1. Metodologias de amostragem e processamento de micro-amostras

2.2. Técnicas espectrométricas acopladas a microscópio (micro-FTIR e micro-Raman)

2.3. Microsondas (electrónica, protónica, fotónica, iónica e de ablação laser associada a espectrometria de massa)

3. Técnicas de análise in-situ

3.1. Técnicas espectrométricas (in-situ FTIR, in-situ Raman, in-situ XR, colorimetria)

3.2. Sistemas em fluxo (análise de injeção em fluxo e sondas electroquímicas)

4. Comparação de métodos: limites de detecção, precisão, resolução espacial e aplicações



Voltar

Prática docente (QUI12207D)

Desempenho das funções associadas a monitor em aulas de uma unidade curricular de Química de 1º ciclo relacionada com a sua área de investigação, com a orientação presencial do docente que tem serviço docente atribuído na unidade curricular.

Voltar

Seminário de Química II (QUI8983D)

O conteúdo programático não é fixo, mas é adaptado às necessidades particulares de cada aluno. O tema a abordar carece da aprovação prévia do júri da UC. Deverá estar relacionado com o tema do projecto de tese do aluno e deverá ser relevante tendo em conta os objectivos e as competências que se pretende aprofundar com o Programa Doutoral. Na monografia o aluno poderá apresentar um resumo histórico, mas deverá salientar todo o trabalho publicado recente de maior destaque e também fazer referência às implicações científicas e sociais. Poderá incluir resultados obtidos pelo aluno ou obtidos em amostras sintetizadas pelo aluno e com a análise dos resultados realizada pelo aluno. As palestras não são fixas tendo incluído, por exemplo: “A concentração e as aplicações térmicas da Energia Solar” (M. Collares Pereira, Cátedra BES de Energias Renováveis, U.Év); “Synthesis and evaluation of anti-tumoral/angiogenic potential of new heterocyclic compounds” (M.J. Queiroz, Centro de Química, U.Minho).

Voltar

Seminário de Química III (QUI8984D)

O programa formal consiste na assistência a conferências organizadas no âmbito do Programa Doutoral, geralmente em colaboração com o Centro de Química de Évora, e na apresentação e discussão pública do trabalho de investigação realizado. As conferências organizadas pela equipa docente são indicadas nos Sumários das UCs de SQ. Alguns exemplos são: “Fluorescent membrane probes behaviour in lipid bilayers” (L.M. Loura, Centro de Química, U.Coimbra); “Design and synthesis of efficient organometallic molecules” (M.H. Garcia, Centro de Ciências Moleculares e Materiais, U.Lisboa); “Aproveitamento Sustentável de Resíduos Sólidos” (L. Oliveira, U.Federal de Minas Gerais, Brasil).

Além da assistência a conferências organizadas pela equipa docente da UC, os alunos são incentivados a realizar cursos específicos na sua área de investigação, e de participar noutras conferências/congressos relacionados com a área geral da sua investigação que se realizem quer na U.Év quer noutra instituição.

Voltar

Seminário de Química IV (QUI8985D)

O programa formal consiste na assistência a conferências organizadas no âmbito do Programa Doutoral, geralmente em colaboração com o CQE, e na apresentação e discussão pública do trabalho de investigação realizado. As conferências organizadas pela equipa docente são indicadas nos Sumários das UCs de SQ. Exemplos são: “Structure Analysis of Porous Materials by EM” (X.D. Zou, Directora do Berzelii Center EXSELENT on Porous Materials, U.Estocolmo, Suécia); “Synthesis, Properties and Applications of IoNanofluids” (C.N. Castro, Director do Centro de Ciências Moleculares e Materiais, U.Lisboa); “Natural Products as Inspiration and Challenge” (H.G. Schmalz, U.Colónia, Alemanha).

Além da assistência a conferências organizadas pela equipa docente da UC, os alunos são incentivados a realizar cursos específicos na sua área de investigação, e de participar noutras conferências/congressos relacionados com a área geral da sua investigação que se realizem quer na U.Év quer noutra instituição.