



Plano de Estudos

Escola: Escola de Ciências e Tecnologia

Grau: Mestrado

Curso: Química (cód. 631)

Especialidade Química de Materiais

1.º Ano - 1.º Semestre

Especialidade Química de Materiais

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8461M	Análise e Caracterização de Materiais	Química	5	Semestral	130
QUI12185M	Materiais Porosos	Química	6	Semestral	156
QUI8465M	Modelação e Simulação em Química	Química	5	Semestral	130
MAT10240M	Planeamento Experimental	Matemática	3	Semestral	78
QUI8462M	Química Orgânica Avançada	Química	5	Semestral	130
QUI8463M	Separação e Identificação de Compostos Orgânicos	Química	6	Semestral	156

1.º Ano - 2.º Semestre

Especialidade Química de Materiais

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8468M	Adsorção em Materiais Nanoporosos	Química	5	Semestral	130
QUI8467M	Catálise Homogénea e Heterogénea	Química	5	Semestral	130
QUI8469M	Princípios de Química Verde	Química	2	Semestral	52

Optativas Grupo I

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8470M	Química de Polímeros	Química	6	Semestral	156
QUI8473M	Eletroquímica e Corrosão	Química	6	Semestral	156
QUI8471M	Materiais Avançados de Carbono	Química	6	Semestral	156
QUI12187M	Química Tecnológica	Química	6	Semestral	156

Optativas Grupo II

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8476M	Materiais Orgânicos e Organometálicos Funcionais	Química	6	Semestral	156
QUI8474M	Química Medicinal	Química	6	Semestral	156
QUI8475M	Síntese Orgânica Avançada	Química	6	Semestral	156
QUI12188M	Propriedades Físico-Químicas e Tecnologia	Química	6	Semestral	156



1.º Ano - 2.º Semestre
Especialidade Química de Materiais

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
Optativas Grupo III					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8478M	Materiais para Eletrónica e Ótica	Química	6	Semestral	156
QUI8480M	Química Quântica	Química	6	Semestral	156
QUI12189M	Química Forense B	Química	6	Semestral	156

2.º Ano - 3.º Semestre
Especialidade Química de Materiais

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI12186M	Seminário	Química	3	Anual	78
Dissertação					

2.º Ano - 4.º Semestre
Especialidade Química de Materiais

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
Dissertação					

Especialidade Química Orgânica

1.º Ano - 1.º Semestre
Especialidade Química Orgânica

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8461M	Análise e Caracterização de Materiais	Química	5	Semestral	130
QUI12185M	Materiais Porosos	Química	6	Semestral	156
QUI8465M	Modelação e Simulação em Química	Química	5	Semestral	130
MAT10240M	Planeamento Experimental	Matemática	3	Semestral	78
QUI8462M	Química Orgânica Avançada	Química	5	Semestral	130
QUI8463M	Separação e Identificação de Compostos Orgânicos	Química	6	Semestral	156

1.º Ano - 2.º Semestre
Especialidade Química Orgânica

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8468M	Adsorção em Materiais Nanoporosos	Química	5	Semestral	130
QUI8467M	Catálise Homogénea e Heterogénea	Química	5	Semestral	130
QUI8469M	Princípios de Química Verde	Química	2	Semestral	52



1.º Ano - 2.º Semestre
Especialidade Química Orgânica

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
Optativas Grupo I					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8470M	Química de Polímeros	Química	6	Semestral	156
QUI8473M	Eletroquímica e Corrosão	Química	6	Semestral	156
QUI8471M	Materiais Avançados de Carbono	Química	6	Semestral	156
QUI12187M	Química Tecnológica	Química	6	Semestral	156
Optativas Grupo II					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8476M	Materiais Orgânicos e Organometálicos Funcionais	Química	6	Semestral	156
QUI8474M	Química Medicinal	Química	6	Semestral	156
QUI8475M	Síntese Orgânica Avançada	Química	6	Semestral	156
QUI12188M	Propriedades Físico-Químicas e Tecnologia	Química	6	Semestral	156
Optativas Grupo III					
Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI8478M	Materiais para Eletrónica e Ótica	Química	6	Semestral	156
QUI8480M	Química Quântica	Química	6	Semestral	156
QUI12189M	Química Forense B	Química	6	Semestral	156

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

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI12186M	Seminário	Química	3	Anual	78
Dissertação					

2.º Ano - 4.º Semestre
Especialidade Química Orgânica

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
Dissertação					



Condições para obtenção do Grau:

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

Área de Especialização em Química dos Materiais

1.º Ano

1.º Semestre:

6 UC obrigatórias num total de 30 Ects

2.º Semestre:

3 UC obrigatórias num total de 12 Ects

2 UC optativas do Grupo I de num total de 12 Ects

1 UC optativa do Grupo I, II ou III de num total de 6 Ects

2.º Ano

3.º e 4.º Semestre:

1 UC obrigatória num total de 3 Ects

Área de Especialização em Química Orgânica

1.º Ano

1.º Semestre:

6 UC obrigatórias num total de 30 Ects

2.º Semestre:

3 UC obrigatórias num total de 12 Ects

2 UC optativas do Grupo II de num total de 12 Ects

1 UC optativa do Grupo I, II ou III de num total de 6 Ects

2.º Ano

3.º e 4.º Semestre:

1 UC obrigatória num total de 3 Ects

Para obtenção do grau, é necessário também a aprovação na Dissertação com um total de 57 ECTS, no 3.º e 4.º Semestre.

Conteúdos Programáticos

[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](#)

Materiais Porosos (QUI12185M)

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 Análise e Caracterização de Materiais e na unidade curricular Adsorção em Materiais Nanoporosos.

[Voltar](#)

Modelação e Simulação em Química (QUI8465M)

Interações moleculares. Modelos de interação intramolecular e modelos de interação intermolecular. Mecânica molecular e campos de forças. Parametização 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 (MAT10240M)

1. Método científico e delineamento de experiências.
 2. Modelos de análise de variância de efeitos fixos e de efeitos aleatórios (simples, multifactoriais e mistos).
 3. Comparações múltiplas.
 4. Blocos completos e incompletos. Quadrados latinos.
 5. Alternativas não paramétricas.
 6. 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.
7. Regressão não linear.

[Voltar](#)

Química Orgânica Avançada (QUI8462M)

Introdução à Teoria das orbitais moleculares de fronteira e reações pericíclicas. Efeitos estereoeletrónicos, 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

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 cátions, 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

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

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

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

Eletroquímica e Corrosão (QUI8473M)

Relevância da Eletroquímica no contexto da Sociedade atual: exposição e conversaç o acerca de casos comuns e de vanguarda.

Eletroquímica no Seio de Fases Condutoras (Revis o).

Eletroquímica na Interface de Fases Condutoras.

T cnicas de caracteriza o eletroqu mica, de esp cies qu micas e de novos materiais, de processos interfaciais ou n o-interfaciais, e de dispositivos eletroqu micos.

Convers o/Armazenamento Eletroqu mico de Energia El trica: C lulas eletroqu micas e supercondensadores.

Eletross ntese e modifica o eletroqu mica: produ o e transforma o eletrol tica de subst ncias inorg nicas, org nicas e de novos materiais.

Eletrometalurgia: t cnicas eletroqu micas de produ o de metais, de acabamento met lico e de processamento met lico.

Processos eletroqu micos de tratamento, de reciclagem e de purifica o de subst ncias e materiais, valiosos ou nocivos.

Corros o: Conceitos fundamentais e relev ncia do seu estudo.

Voltar

Materiais Avan ados de Carbono (QUI8471M)

Programa resumido:

1: Apresenta o. 2: Estrutura. 3: Reatividade. 4: Precursores. 5: Caracteriza o Textural. 6: Caracteriza o Qu mica. 7: Negro de Fumo. 8: Carv o Ativado. 9: Membranas e Peneiros Moleculares de Carbono. 10: Fibras e Comp sitos de Carbono. 11: Carbono em Metalurgia. 12: Fullerenos, Nanotubos e Grafeno. 13: Carbono em Eletroqu mica e Cat lise. 14: Diamante.

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

Voltar

Qu mica Tecnol gica (QUI12187M)

Produ o de bens em qu mica. No o de commodity e especialidade. Exemplos de alguns processos qu micos de produ o de mol culas: base para explicita o de conceitos. O processo qu mico e sua representa o. Balan os de massa e energia. Aplica es. Etapas do processo. Reactor: tipos de reactores. Balan os e dimensionamento. Opera es unit rias. Permutadores de calor. Processos de separa o. Os processos de separa o mais comuns e sua descri o. Destila o e extrac o l quidol quido: funcionamento e design. Optimiza o e qualidade. Controlo de qualidade de processo e produto.

Voltar

Materiais Org nicos e Organomet licos Funcionais (QUI8476M)

Conceitos b sicos de materiais moleculares funcionais: perspectiva dos compostos org nicos e organomet licos. M todos de s ntese de materiais org nicos e organomet licos funcionais. Descri o de materiais org nicos e organomet licos para aplica o em qu mica, f sica e biologia/medicina. Sensores qu micos: compostos macroc clicos, fullerenos, polim ricos e supramoleculares. Aplica o em f sica: condutores e comutadores moleculares, LEDs, cristais l quidos, materiais luminescentes, materiais moleculares optoelectr nicos n o lineares, materiais fotocr micos, materiais para pain is solares, sistemas fotovoltaicos e grava o  ptica, etc.). Aplica o em biologia e medicina: sensores, liga o a ADN, agentes anti-tumorais, combate a doen as degenerativas, etc.).



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

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 reações).

Síntese combinatória.

Voltar

Propriedades Físico-Químicas e Tecnologia (QUI12188M)

Previsão, estimativa e correlação de propriedades. Importância tecnológica de propriedades físicoquímicas. Densidades de fluidos. Equações de estado. Segundos coeficientes de virial e forças intermoleculares. Estimativa de densidades. Pressões de vapor de líquidos e sólidos e entalpias de vaporização e sublimação. Interpretação molecular. Equilíbrio líquido-vapor de misturas. Cálculo e estimativa de coeficientes de actividade. Solubilidades de gases em líquidos. Viscosidade. Viscosímetros e reómetros. Fundamento teórico do cálculo de viscosidades e estimativa. Condutividade térmica. Coeficientes de difusão: princípios e aplicações. Capacidade calorífica e tensão superficial. Propriedades e aplicação tecnológica. Fluidos supercríticos: extracção e meio reaccional. Micronização. Aplicações de compostos fluorados e líquidos iónicos. Emulsões e bolhas de gases respiratórios. Anestesia gasosa. Modulação de fluidez. Permeação transmembranar.

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](#)

Química Forense B (QUI12189M)

Introdução à ciência forense e aos procedimentos de investigação criminal.

Funcionamento de um laboratório forense.

Métodos analíticos em química forense.

Análise de cenas de crime.

Manuseamento de evidências físicas.

A química da recolha de impressões digitais.

A química do tratamento de fibras e análise forense de fibras e cabelos.

Análise de drogas de abuso e seus metabolitos, métodos presuntivos e conclusivos.

Venenos mais usados em crimes, meios de acção e sua análise.

Métodos espectroscópicos de análise de tintas e plásticos.

Sistemas inorgânicos como meios de prova, vidro e solo.

Aplicação de métodos químicos na análise de vestígios biológicos.

Examinação de documentos.

Caracterização da mistura de hidrocarbonetos em fogos e incêndios.

Como descobrir quem disparou e que arma foi usada no crime.

[Voltar](#)

Seminário (QUI12186M)

A unidade curricular contempla duas componentes distintas mas complementares. Por um lado, os estudantes 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 estudantes e que poderá estar relacionado com o tema da dissertação. Cada estudante apresentará o seu trabalho em formato Powerpoint, a que se seguirá um período de discussão.