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 Cientifica	ECTS	Duração	Horas
QUI08461M	Análise e Caracterização de Materiais	Química	5	Semestral	130
QUI12185M	Materiais Porosos	Química	6	Semestral	156
QUI08465M	Modelação e Simulação em Química	Química	5	Semestral	130
MAT10240M	Planeamento Experimental	Matemática	3	Semestral	78
QUI08462M	Química Orgânica Avançada	Química	5	Semestral	130
QUI08463M	Separação e Identificação de Compostos Orgânicos	Química	6	Semestral	156

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

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

Optativas Grupo I

Código	Nome	Área Cientifica	ECTS	Duração	Horas
QUI08470M	Química de Polímeros	Química	6	Semestral	156
QUI08473M	Eletroquímica e Corrosão	Química	6	Semestral	156
QUI08471M	Materiais Avançados de Carbono	Química	6	Semestral	156
QUI12187M	Química Tecnológica	Química	6	Semestral	156

Optativas Grupo II

Código	Nome	Área Cientifica	ECTS	Duração	Horas
QUI08476M	Materiais Orgânicos e Organometálicos Funcionais	Química	6	Semestral	156
QUI08474M	Química Medicinal	Química	6	Semestral	156
QUI08475M	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 Cientifica	ECTS	Duração	Horas

Optativas Grupo III

Código	Nome	Área Cientifica	ECTS	Duração	Horas
QUI08478M	Materiais para Eletrónica e Ótica	Química	6	Semestral	156
QUI08480M	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 Cientifica	ECTS	Duração	Horas
QUI12186M	Seminário	Química	3	Anual	78
Dissertação					

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

Código	Nome	Área Cientifica	ECTS	Duração	Horas
Dissertação					

Especialidade Química Orgânica

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

Código	Nome	Área Cientifica	ECTS	Duração	Horas
QUI08461M	Análise e Caracterização de Materiais	Química	5	Semestral	130
QUI12185M	Materiais Porosos	Química	6	Semestral	156
QUI08465M	Modelação e Simulação em Química	Química	5	Semestral	130
MAT10240M	Planeamento Experimental	Matemática	3	Semestral	78
QUI08462M	Química Orgânica Avançada	Química	5	Semestral	130
QUI08463M	Separação e Identificação de Compostos Orgânicos	Química	6	Semestral	156

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

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

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

Código	Nome	Área Cientifica	ECTS	Duração	Horas

Optativas Grupo I

Código	Nome	Área Cientifica	ECTS	Duração	Horas
QUI08470M	Química de Polímeros	Química	6	Semestral	156
QUI08473M	Eletroquímica e Corrosão	Química	6	Semestral	156
QUI08471M	Materiais Avançados de Carbono	Química	6	Semestral	156
QUI12187M	Química Tecnológica	Química	6	Semestral	156

Optativas Grupo II

Código	Nome	Área Cientifica	ECTS	Duração	Horas
QUI08476M	Materiais Orgânicos e Organometálicos Funcionais	Química	6	Semestral	156
QUI08474M	Química Medicinal	Química	6	Semestral	156
QUI08475M	Síntese Orgânica Avançada	Química	6	Semestral	156
QUI12188M	Propriedades Físico-Químicas e Tecnologia	Química	6	Semestral	156

Optativas Grupo III

Código	Nome	Área Cientifica	ECTS	Duração	Horas
QUI08478M	Materiais para Eletrónica e Ótica	Química	6	Semestral	156
QUI08480M	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 Cientifica	ECTS	Duração	Horas
QUI12186M	Seminário	Química	3	Anual	78
Dissertação					

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

Código	Nome	Área Cientifica	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.ºAno

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 4º Semestre:

1 UC obrigatória num total de 3 Ects

Área de Especialização em Química Orgânica

1.ºAno

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 4º 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 (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 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 fotoeletrões 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. {\}newline

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 (QUI08465M)

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

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 (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, Curtuis, 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/problemas de 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 hifenadas (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 (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

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

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 · Profª Paula Robalo | ISEL e Centro de Química Estrutural (IST-UNL)

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, poliesteres, poliesteres 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 Tg e Tm; Estrutura vs. propriedades mecânicas. Comparação de valores de Tg, Tm 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. Aplicaçoes 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

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 espetroscopia 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, Electroquímica 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. Groysman, Corrosion for Everybody, Springer, Dordretch, 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

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: Fulerenos, Nanotubos e Grafeno. 13: Carbono em Eletroquímica e Catálise. 14: Diamante.
O programa téorico é complementado por um pequeno projeto laboratorial realizado num bloco no meio do semestre e por aulas de problemas.

Voltar

Química Tecnológica (QUI12187M)

Produção de bens em química. Noção de commodity e especialidade. Exemplos de alguns processos químicos de produção de moléculas: base para explicitação de conceitos. O processo químico e sua representação. Balanços de massa e energia. Aplicações. Etapas do processo. Reactor: tipos de reactores. Balanços e dimensionamento. Operações unitárias. Permutadores de calor. Processos de separação. Os processos de separação mais comuns e sua descrição. Destilação e extracção líquidolíquido: funcionamento e design. Optimização e qualidade. Controlo de qualidade de processo e produto.

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 fotocrómicos, 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

Química Medicinal (QUI08474M)

PROGRAMA TEÓRICO

Parte A

1.1. Introdução à Química Medicinal, sua importância e perspetiva 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

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. Faces enantiotópicas e diastereotópicas, Ataque por face-Re e por face-Si. O excesso enantiómerico (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

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 (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 polielectrónicos. 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.