



Plano de Estudos

Escola: Escola de Ciências e Tecnologia

Grau: Mestrado

Curso: Química (cód. 725)

1.º Ano - 1.º Semestre

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI13540M	Análise e Caracterização de Materiais	Química	6	Semestral	156
QUI13541M	Materiais Porosos	Química	6	Semestral	156
QUI13538M	Química Orgânica Aplicada	Química	6	Semestral	156
QUI13518M	Análise e Caracterização de Compostos Orgânicos	Química	6	Semestral	156
QUI13520M	Química do Ambiente	Química	6	Semestral	156

1.º Ano - 2.º Semestre

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI13521M	Modelação e Simulação em Química	Química	6	Semestral	156
QUI13544M	Catálise e Métodos Catalíticos	Química	6	Semestral	156

Optativas

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI13542M	Adsorção em Materiais	Química	6	Semestral	156
QUI13527M	Materiais Funcionais	Química	6	Semestral	156
QUI13549M	Polímeros e Aplicações	Química	6	Semestral	156
QUI13522M	Química Medicinal	Química	6	Semestral	156
QUI13537M	Síntese de Compostos Bioativos	Química	6	Semestral	156
QUI13526M	Análise e Tratamento de Águas e Valorização de Efluentes Líquidos	Química	6	Semestral	156
QUI13523M	Valorização de Resíduos Sólidos	Química	6	Semestral	156
QUI13524M	Eletroquímica e Corrosão	Química	6	Semestral	156
QUI13525M	Moléculas e Tecnologia	Química	6	Semestral	156

2.º Ano - 3.º Semestre

Código	Nome	Área Científica	ECTS	Duração	Horas
QUI13543M	Seminário	Química	3	Anual	78
Dissertação					



2.º Ano - 4.º Semestre

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:

1.º Ano

1.º Semestre:

5 UC obrigatórias num total de 30 ECTS

2.º Semestre:

2 UC obrigatórias num total de 12 ECTS

3 UC optativas do Grupo Optativas num total de 18 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 (QUI13540M)

Componente teórica

1. Teoria, sistemas e equipamentos de vácuo. 2. Química superficial. 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. Densidade verdadeira, densidade aparente e densidade global de sólidos. 5. Espectroscopias de infravermelho, de Raman e de ressonância magnética nuclear. 6. Microscopia. 7. Termoanálise e microcalorimetria. 8. Digestão de amostras sólidas e análise por ICP.

Componente prática

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

[Voltar](#)

Materiais Porosos (QUI13541M)

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, influência das condições na porosidade e aplicações de materiais porosos, nomeadamente: materiais de carbono; zeólitos e zeótipos; argilas e argilas com pilares; materiais mesoporosos ordenados; materiais híbridos inorgânicos-orgânicos; materiais compósitos porosos. Métodos de regeneração de materiais porosos. Métodos de modificação para controlo das propriedades dos materiais.

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.



[Voltar](#)

Química Orgânica Aplicada (QUI13538M)

Compostos orgânicos antropogénicos. Poluentes orgânicos persistentes (POPs), hidrocarbonetos, solventes orgânicos e compostos orgânicos voláteis (VOCs), compostos perfluorados (PFCs), retardantes de chama, produtos de limpeza e inibidores de corrosão, fármacos e produtos de cuidado pessoal, pesticidas e outros.

Reações de compostos orgânicos (como por exemplo, medicamentos, poluentes etc.) e mecanismos. Reações de hidrólise, redução, oxidação e reações na formação de ligações C-C.

Reações fotoquímicas de compostos selecionados.

Biotransformações. Reações mediadas por microorganismos. Reações catalisadas por enzimas.

[Voltar](#)

Análise e Caracterização de Compostos Orgânicos (QUI13518M)

Técnicas de separação e isolamento de compostos orgânicos:

Cromatografia em coluna, HPLC e GC.

Fases estacionárias, sistemas de eluição e modos de deteção.

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](#)

Química do Ambiente (QUI13520M)

Poluentes e sua ação. Ozono estratosférico. Smog fotoquímico. Chuvas ácidas. Partículas em suspensão. Compostos orgânicos voláteis. Gases de efeito de estufa. Metais e compostos metálicos. Monitorização de poluentes atmosféricos. Legislação ambiental. Métodos padrão de monitorização dos principais poluentes.

Equilíbrios Químicos em Águas Naturais: Equilíbrios ácido-base, de solubilidade e redox. Ciclo e Regulação Natural de Metais

Vestigiários em Ambientes Aquáticos: Ciclo global dos metais; Interface sólido - líquido; Complexação por substâncias húmicas;

Sistemas hidrofóbicos; Regulação de metais pesados em rios, lagos e oceano. Regulação da Composição Química das Águas

Naturais: Ciclo biogeoquímico do carbono, do azoto, do enxofre e suas interdependências. Natureza e Tipos de Poluentes dos

Meios Aquáticos: Eutrofização. Modelação da Qualidade da Água.

[Voltar](#)

Modelação e Simulação em Química (QUI13521M)

Interações moleculares. Modelos de interação intra-molecular e modelos de interação

inter-molecular. Mecânica molecular e campos de forças. Revisões de Mecânica Estatística.

Introdução às simulações. Condições de fronteira periódicas. Trajetórias e propriedades.

Dinâmica molecular. Simulações no ensemble microcanónico, canónico e isobárico.

Monte Carlo de Metropolis. Ensemble canónico, isotérmico-isobárico, grande canónico e de Gibbs. Amostragens não-Boltzmannianas. Análise de resultados de simulação. Análise da equilibração das simulações. Funções de distribuição radial.

Propriedades mecânicas. Funções de correlação. Propriedades dinâmicas. Exemplos de aplicação de simulação de Monte Carlo e

Dinâmica Molecular para o cálculo de propriedades (densidade, pressão de vapor, coeficiente de difusão, viscosidade, solubilidade)

e análise de estrutura em sistemas modelo envolvendo soluções aquosas de poluentes, solventes alternativos, gases dissolvidos em líquidos, combustíveis e lubrificantes



[Voltar](#)

Catálise e Métodos Catalíticos (QUI13544M)

Importância da catálise e modo de funcionamento dos catalisadores. Visão geral dos tipos de catálise.

Catálise homogénea. Conceitos fundamentais. Química de coordenação e organometálica: conceitos, reações fundamentais e mecanismos. Papel do centro metálico e dos ligandos. Ciclos catalíticos, aspetos cinéticos e de regeneração de catalisadores. Novas tendências em catalisadores homogéneos e novos ligandos.

Catálise heterogénea. Conceitos fundamentais. Materiais para catálise heterogénea. Desativação e preparação de catalisadores. Cinética e Mecanismos. Caracterização espectroscópica de catalisadores e superfícies. Introdução aos reatores catalíticos. Bio-, electro- e fotocatálise. Organocatálise. Catálise supramolecular. Organocatalisadores imobilizados. Líquidos iónicos como catalisadores.

Casos de estudo: aplicações em síntese química, fontes de energia a partir de recursos renováveis e remediação ambiental.

[Voltar](#)

Adsorção em Materiais (QUI13542M)

Componente 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.

Componente prática

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

[Voltar](#)

Materiais Funcionais (QUI13527M)

Conceito de materiais funcionais. Visão geral dos materiais funcionais e suas aplicações.

Energia solar: células fotovoltaicas, termofotovoltaicas e fotoelectroquímicas. Síntese e design de corantes orgânicos como sensibilizadores para células solares (DSSCs).

Produção e armazenamento de hidrogénio: produção eletrolítica e métodos de armazenamento. Células de combustível: processamento de hidrocarbonetos e combustíveis alternativos. Baterias de ião lítio e supercondensadores.

Materiais para optoelectrónica e fotónica, materiais electro- e fotocromáticos, comutação molecular, materiais luminescentes.

Sensores químicos e biosensores. Síntese e design de fluoróforos para marcação de biomoléculas.

Materiais inteligentes para libertação controlada de fármacos e outras substâncias. Biomateriais.

Materiais para decomposição química e fotocatalítica de compostos orgânicos e remoção de poluentes.

[Voltar](#)

Polímeros e Aplicações (QUI13549M)

1: Introdução aos Polímeros. 2: Estrutura Molecular de Polímeros. 3: Mecanismos de Polimerização. 4: Propriedades de Polímeros. 5: Processamento de Polímeros. 6: Elastómeros e Géis. 7: Polímeros Reticulados. 8: Polímeros Naturais. 9: Síntese de Polímeros. 10: Caracterização de Polímeros. 11: Biomateriais. 12: Aplicações em Saúde, Energia, Transportes, Construção, Ambiente. 13: Os Polímeros na Economia Circular. 14: Perspetivas Futuras.



[Voltar](#)

Química Medicinal (QUI13522M)

- Introdução à Química Medicinal, sua importância e perspectiva histórica. Nomenclatura e classificação dos fármacos.
- Modo de ação dos fármacos e alvos terapêuticos: mecanismos moleculares da ação dos fármacos em lípidos, glúcidos, proteínas e ácidos nucleicos. Recetores; reconhecimento molecular e comunicação celular.
- Ciclo geral dos fármacos no organismo. Farmacocinética: Absorção, Distribuição, Metabolismo e Excreção dos fármacos; pró-fármacos.
- Relações qualitativas e quantitativas estrutura-atividade (SARs).
- Principais fontes de obtenção de fármacos. Métodos de procura, descoberta e isolamento de novos fármacos; desenvolvimento e produção de novos fármacos.
- Desenvolvimento e produção de novos fármacos.
- Estudo de alguns fármacos: estruturas químicas, métodos de obtenção, mecanismos de ação, relação estrutura-atividade, farmacodinâmica, farmacocinética e aplicações.

[Voltar](#)

Síntese de Compostos Bioativos (QUI13537M)

Importância das moléculas bioativas e campos de actuação (fármacos, biocidas, etc). A Síntese Química na obtenção de moléculas bioativas: “descoberta”, “planeamento”, síntese orientada para a molécula-alvo (“target oriented synthesis”), para a diversidade (“diversity-oriented synthesis”) e planeamento baseado na estrutura (“structure based design”). Análise retrosintética. Interconversão de grupos funcionais. Reações de “cross coupling” catalisadas por metais de transição: exemplos. Rearranjos moleculares. Síntese assimétrica. Estereosseletividade e regioselectividade. Grupos de proteção. Síntese Química sustentável; novos processos de síntese com tecnologias verdes: biocatálise, síntese assistida por micro-ondas, etc. A Síntese de APIs à escala industrial; abordagem ao scale-up. Equipamento, pureza e controlo nas diferentes fases da síntese a nível industrial. Separação, purificação e secagem dos produtos. Divulgação dos resultados e proteção da propriedade intelectual. Patentes.

[Voltar](#)

Análise e Tratamento de Águas e Valorização de Efluentes Líquidos (QUI13526M)

1. Gestão de sistemas de abastecimento de água
Caracterização quantitativa e qualitativa de águas
Processos de tratamento de água para consumo
Parâmetros de dimensionamento dos principais órgãos
Etapas do sistema de abastecimento de água
Legislação
2. Tipos de águas residuais
Caracterização das águas residuais
Cargas poluentes em efluentes municipais
Normas de descarga
3. Processos de tratamento de águas residuais
Processos físicos, químicos e biológicos
Descrição, aplicações e parâmetros de dimensionamento dos principais órgãos
4. Etapas do sistema de tratamento de efluentes urbanos e industriais
Objetivos e processos utilizados em cada uma das etapas de tratamento
5. Valorização dos efluentes tratados
Reutilização de efluentes tratados
Impacte ambiental e riscos para a saúde
6. Tratamento e destino final das lamas de ETAR
Caracterização qualitativa e quantitativa das lamas
Tratamento e destino final
7. Processos alternativos ou complementares de tratamento
8. Exemplos de aplicação



[Voltar](#)

Valorização de Resíduos Sólidos (QUI13523M)

- 1 - Introdução
- 2 - Definição e classificação dos resíduos
- 3 - Caracterização da perigosidade dos resíduos sólidos
- 4- Produção nacional de resíduos sólidos
- 5- Características físicas, químicas e biológicas dos resíduos sólidos urbanos (RSU)
- 6- Fontes, tipos e características de resíduos perigosos presentes em RSU
- 7- Resíduos industriais e agrícolas
- 8- Enquadramento legislativo, nacional e europeu
- 9- Gestão dos resíduos: operadores, infra-estruturas e instalações a nível nacional e Regional
- 9.1. Recolha e transporte de resíduos sólidos;
- 9.2. Separação e processamento de resíduos sólidos;
10. Valorização de resíduos sólidos urbanos, industriais e agrícolas
- 10.1. Valorização energética;
- 10.2. Compostagem;
- 10.3. Reciclagem e reutilização;
- 10.4. Valorização industrial.

[Voltar](#)

Eletroquímica e Corrosão (QUI13524M)

Relevância da Eletroquímica no contexto da Sociedade atual e de um desenvolvimento sustentável.

Aspetos teóricos e práticos fundamentais de Eletroquímica no seio de fases condutoras e na interface destas.

Técnicas de caracterização eletroquímica, de espécies químicas e de novos materiais, de processos, e de dispositivos eletroquímicos. Conversão e Armazenamento eletroquímico de energia elétrica: Células primárias, secundárias, de combustível, fotoeletroquímicas, e supercondensadores.

Eletrossíntese e modificação eletroquímica: produção (e.g., H₂) e transformação eletrolítica de substâncias inorgânicas, orgânicas e de materiais inovadores.

Processos eletroquímicos de tratamento, de reciclagem, de eliminação e de purificação de substâncias e materiais, valiosos ou nocivos.

Eletrometalurgia: produção de metais, acabamento e processamento metálico.

Corrosão Metálica: Conceitos fundamentais, impactos negativos do fenómeno, técnicas de monitorização, e medidas de proteção e controlo.

[Voltar](#)

Moléculas e Tecnologia (QUI13525M)

Tecnologia molecular. Fluorocarbonetos. Transporte de oxigénio. Densidade: medida e estimativa. Compressibilidade. Solubilidade de gases em líquidos. Captura de carbono. Permeação gasosa. Anestésicos por inalação. Interação anestésico-membrana celular. Pressão de vapor: medida e estimativa. Líquidos iónicos: microestrutura: Viscosidade: medida e estimativa. Ionogéis. Cristais líquidos. Solventes eutéticos e Química Verde. Extração líquido-líquido de poluentes. Hidrogéis. Princípios de reologia. Fluidos supercríticos. Extração supercrítica, meios reacionais e micronização. Constantes críticas: medida e estimativa. Fármacos: processamento. Co-cristalização e co-solvência. Drug delivery. Destino ambiental e remoção. Difusão. Coeficiente de difusão: medida e estimativa. Refrigerantes clássicos e alternativos. Calor latente de vaporização: medida e estimativa. Refrigerantes como poluentes. Nanofluidos: exemplos, princípios e aplicações. Condutividade térmica: medida e estimativa.



[Voltar](#)

Seminário (QUI13543M)

A UC contempla duas componentes distintas, mas complementares. Por um lado, os estudantes deverão assistir a palestras, tendo posteriormente de elaborar individualmente um resumo escrito de palestras selecionadas.

Os temas das palestras não são fixos, sendo alguns exemplos de palestras convidadas: "Molybdenum (VI) oxo complexes: versatile catalysts for olefin epoxidation"; "Highly active hydroformylation catalysts: development, performance and immobilisation"; "Silicatos e MOF microporosos e fotoluminescentes"; "Fighting cancer with new ruthenium drugs: a challenge"; "Fluorescência molecular: dos vetores de fase aos OLEDs de 3ª geração".

Por outro lado, na outra componente da unidade curricular cada estudante fará duas apresentações orais individuais. A 1ª será 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. A 2ª será sobre resultados obtidos no âmbito do trabalho de dissertação.