



UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO
COORDENADORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA - CPGQuim
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA - CCET

Avenida dos Portugueses, s/n - Bacanga - 65.085-580 São Luís (Ma)
Fone/FAX: (98) 2109 8245 – cpqquim@ufma.br – www.quimica.ufma.br/cpqquim

TEQ: infravermelho, análise multivariada e redes neurais artificiais

Carga Horária: 30 (trinta) horas

Créditos: 02 (dois)

Ementa:

Introdução aos métodos Espectrométricos, Infravermelho Médio (MIR), Transições Vibracionais, Interpretação de Espectros, Espectroscopia no Infra-vermelho próximo (NIR), Aplicações em Análises Qualitativas e Quantitativas. Quimiometria, Introdução, Sub-áreas da Quimiometria, Técnicas de Análise Multivariada, Análise por Componentes Principais (PCA), Análise Hierárquica de Agrupamentos (HCA), Calibração Multivariada, Regressão Linear Múltipla (MLR), Regressão em Componentes Principais (PCR), Regressão em Mínimos Quadrados Parciais (PLS), Redes Neurais Artificiais (ANN), aplicações em IR e Métodos Eletroanalíticos.

Bibliografia:

Livros e Artigos:

- Silverstein, R. M.; Webster, F. X.; Kiemle, D. J.; Tradução da 7ª Edição - Ricardo Bicca de Alencastro; Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos, Rio de Janeiro; Editora LTC; 2007.
- Skoog, D. A.; Holler, F. J.; Crouch, S. R.; Princípios de Análise Instrumental, Tradução da 6ª Edição – Celio Pasquini; Porto Alegre; Editora Bookman; 2009.
- Massart, D. L., Vandeginste, B. G. M., Buydens, L. M. C., de Jong, S., Lewi P. J., Smeyers-Verbeke, J., Handbook of Chemometrics and Qualimetrics: Parts A e B, Elsevier, Amsterdam, 1997.
- Beebe, K. R., Pell, R.J. and Seasholtz, M.B.; Chemometrics - A Pratical Guide, Wiley-Interscience, New York, 1998.
- Sharaf, M. A.; Illman, D. L. and Kowalski, B. R.; Chemometrics; Wiley-Interscience (1986).
- Ferreira, M. M. C. et al., Quimiometria I: calibração multivariada, um tutorial, Química Nova, 22 (1999), 724 - 731.

Revistas Especializadas

Applied Spectroscopy; Journal of Near Infrared Spectroscopy (JNIRS); Química Nova; Journal of Chemometrics; Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems; Analytical Chemistry; Analytica Chimica Acta; The Analyst.