

ANEXO 1 – PROVA DE SELEÇÃO PARA O PPGQ-UFPeI MESTRADO E DOUTORADO – 2020-1

A prova escrita consistirá de 12 (doze) questões, sendo 3 (três) de QUÍMICA ANALÍTICA, 3 (três) de FÍSICO-QUÍMICA, 3 (três) de QUÍMICA INORGÂNICA e 3 (três) de QUÍMICA ORGÂNICA. **O candidato deverá responder às 12 questões da prova durante o período disponibilizado para realização da mesma (240 minutos ou 4 horas).**

Tópicos das áreas:

QUÍMICA ANALÍTICA

1. Tratamento Estatístico de Dados Analíticos

- a) média, desvio padrão, desvio padrão relativo, erros, etc.
- b) teste T, teste F, teste de rejeição, etc

2. Equilíbrios Químicos em Solução Aquosa

3. Preparo e Padronização de Soluções

4. Métodos Clássicos de Análise:

- a) Volumetrias (neutralização, precipitação, óxido-redução e complexação);
- b) Gravimetria;

5. Métodos Instrumentais de Análise:

- a) Ópticos: absorção molecular, fluorescência, absorção e emissão atômica;
- b) Eletroquímicos: potenciometria
- c) Separação: extração líquido-líquido, sólido-líquido
- d) Cromatografias (gasosa, HPLC)

6. Métodos de Preparo de Amostras para Análise Elementar

FÍSICO-QUÍMICA

1. Termodinâmica:

- a) Propriedades dos gases;
- b) Leis da termodinâmica;
- c) Relações entre variações de propriedades termodinâmicas e sua dependência com temperatura, pressão e composição do sistema;
- d) Equilíbrio químico e espontaneidade de processos químicos;
- e) Termodinâmica de misturas e diagramas de fase.

2. Cinética Química:

- a) Velocidade de reação;
- b) Leis integradas de velocidade;
- c) Efeitos de temperatura e catálise.

3. Eletroquímica

- a) Medidas de potenciais padrão
- b) Eletroquímica dinâmica
- c) Processos eletródicos

QUÍMICA INORGÂNICA

1. Compostos metálicos, iônicos e covalentes:

Nomenclatura de compostos inorgânicos; Estruturas de sólidos metálicos e iônicos, modelo VSEPR, simetria molecular (elementos e operações de simetria); Ligações químicas em compostos metálicos, iônicos e covalentes; Teoria do orbital molecular, Teoria de bandas (condutores metálicos, isolantes e semicondutores); Forças intermoleculares (Ligação de Hidrogênio, interação dipolo permanente – dipolo permanente, interação dipolo induzido – dipolo induzido).

2. Estrutura Atômica e Propriedades Periódicas:

Modelo mecânico-quântico do átomo de hidrogênio e de átomos polieletrônicos, Funções de onda radiais e angulares; Interpretação de Born (amplitude da probabilidade, densidade da probabilidade e distribuição radial da densidade de probabilidade),

distribuição eletrônica; princípio da construção da tabela periódica, propriedades periódicas.

3. Compostos de coordenação (Complexos de metais de transição e Compostos organometálicos):

Nomenclatura dos compostos de coordenação, Isomeria em compostos de coordenação, Teoria do campo cristalino (desdobramento dos orbitais *d* em campos octaédricos, tetraédricos, tetragonais e quadráticos; ligantes do campo forte e do campo fraco: série espectroquímica), Efeito Jahn-Teller, Teoria do campo ligante, Propriedades magnéticas e ópticas de compostos de coordenação, Reações e estabilidade de compostos de coordenação.

4. Ácidos e bases:

- Definições segundo Bronsted-Lowry e Lewis;
- Cálculos de K_a , K_b , pK_a , pK_b , pH;
- Conceito de Pearson (princípio HSAB)

QUÍMICA ORGÂNICA

1. Estrutura, Nomenclatura e Propriedades Físicas das Funções Orgânicas.

2. Isomeria:

Constitucional, Conformacional, Geométrica e Óptica.

3. Substituição Nucleofílica Alifática:

Mecanismo S_N1 e S_N2 – Estrutura e reatividade.

4. Substituição Eletrofílica Aromática:

Mecanismo. Estrutura e reatividade. Efeitos de Grupos ativantes e desativantes.

Reações: nitração, alquilação, acilação e sulfonação.

5. Reações de Eliminação:

Mecanismo E_2 , E_1 – Estrutura e reatividade. Regioquímica – produto de Zaytzev e Hoffman. Mecanismos competitivos: substituição versus eliminação.

6. Reações de Adição Eletrofílica:

Mecanismo da adição de eletrófilos a alquenos, alquinos e dienos. Reatividade.

Estereoquímica. Mecanismos via íons cíclicos – bromônio.

7. Reações de Adição Nucleofílica:

Mecanismo da adição de espécies nucleofílicas a compostos carbonílicos e derivados de ácidos carboxílicos.

Bibliografia Recomendada:

- John C. Kotz e Paul Treichel Jr., “Química Geral e Reações Químicas”, vol. 1 e 2, São Paulo; Thomson, 2005.
- Daniel C. Harris, “Análise Química Quantitativa”, 8ª ed.; Rio de Janeiro; LTC, 2012;
- Holler, F. J.;Skoog, D. A.; Crouch, S. R. Princípios de Análise Instrumental. 6ª ed. Bookman, Porto Alegre, RS, 2009.
- Castellan, G. “Fundamentos de Físico-Química”, Livros Técnicos e Científicos Editora, 1986.
- Atkins, P. W., Paula, J., “Físico-Química”, vol. 1 e 2, LTC, 2004.
- Lee, J.D.; Química Inorgânica não tão concisa, São Paulo, Edgard Blucher, 2000.
- Peter W. Atkins *et al.* “Química Inorgânica”, Porto Alegre; Bookman, 2008.
- Thomas W. Solomons, “Química Orgânica”, vol. 1 e 2, 8ª ed., Rio de Janeiro; LTC, 2005/2006.
- Paula Y. Bruice, “Química Orgânica”, vol. 1 e 2, 4ª ed., São Paulo; Pearson Prentice Hall, 2006.
- Krug, F.J.; Rocha, F. R. P.; Métodos de preparo de amostras para análise elementar, 1 ed., EDIT-SBQ, São Paulo, 2016.

ANEXO 2 - CRITÉRIOS DE SELEÇÃO PARA O INGRESSO NO PPGQ UFPeI MESTRADO E DOUTORADO (2020-1)

NOTA DA PROVA ESCRITA: 60%

PONTUAÇÃO DA ANÁLISE CURRICULAR: 40%

1. Trabalhos publicados ou aceitos* em revistas científicas indexadas: **3,0 pontos por trabalho**. Para cada trabalho, os 3,0 pontos deverão ser multiplicados pela faixa do fator de impacto da revista, conforme estabelecido no Anexo 3. A somatória da pontuação obtida deverá ser adicionada na Tabela contida no Anexo 3;
2. Patentes: O número de patentes deverá ser multiplicado pelo **peso do item**, conforme estabelecido no Anexo 3. Para fins deste edital serão aceitos apenas registros com número no INPI ou órgão equivalente no exterior.
3. Livro e/ou capítulo de livro relacionado com a área da química: O número de livros e/ou capítulos de livros publicados deverá ser multiplicado pelo **peso do item**, conforme estabelecido no Anexo 3;
4. Trabalhos apresentados em eventos científicos locais e regionais (ex. CIC, SBQ-Sul, ENPOS, EDEQ): **0,1 ponto por trabalho**[§];
5. Trabalhos apresentados em eventos científicos nacionais (ex. SBQ, ENQA, SIBEE): **0,2 ponto por trabalho**[§];
6. Trabalhos apresentados em eventos científicos internacionais (ex. Euromat, SPIE, Rio Symposium, BMOS): **0,5 ponto por trabalho**[§];
7. Participação em Programas de Iniciação Científica/Tecnológica com bolsa, comprovada com certificado ou termo de outorga: **0,15 ponto por mês**;
8. Participação em Iniciação Científica/Tecnológica sem bolsa, comprovada com carta do orientador e trabalhos científicos: **0,05 ponto por mês**;
9. Participação em outros programas institucionais na área da química ou áreas afins, devidamente comprovada (Exemplo: PIBID, Monitoria, PROBEC): **0,05 ponto por mês**;
10. Participação em cursos e minicursos com duração de, no mínimo, 4 horas relacionados com a química: **0,2 ponto por evento**. **A participação em Evento Científico NÃO será pontuada.**

* Aceito com comprovação: DOI ou carta de aceite do Editor. No dia da prova escrita, o candidato poderá incluir artigos aceitos e/ou publicados após o período de inscrição. Para isto, o candidato deverá entregar uma cópia da primeira página do artigo ou manuscrito juntamente com a carta de aceite da revista científica, antes do início da prova escrita para a Comissão de Seleção.

[§]Serão considerados apenas os trabalhos **acompanhados dos comprovantes de apresentação e de participação do candidato** no evento.