



**MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PIAUÍ
CENTRO DE CIÊNCIAS DA NATUREZA
COORDENAÇÃO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA**

ANEXO 1

**PROGRAMA PARA A PROVA ESCRITA DE SELEÇÃO DO CURSO DE MESTRADO
EM QUÍMICA**

- 1) **PROPRIEDADES PERIÓDICAS DOS ELEMENTOS.**
Raio atômico; raio iônico; energia de ionização, afinidade eletrônica, eletronegatividade e ciclo de Born-Haber.
- 2) **LIGAÇÕES QUÍMICAS**
Teoria de repulsão de pares de elétrons na camada de valência (método VSEPR); a ressonância, carga formal e princípio da eletroneutralidade. Teoria de ligação de valência (TLV): Hibridação em moléculas poliatômicas; participação do orbital d nas ligações e ligação σ e π . Teoria do campo cristalino (TCC): Energia de estabilização do campo cristalino (EECC); determinação do desdobramento do campo cristalino; fatores que alteram a magnitude da energia do campo cristalino; espectros eletrônicos dos compostos de coordenação; distorções tetragonais da geometria octaédrica. Teoria do orbital molecular (TOM): Forma e simetria dos orbitais moleculares; moléculas diatômicas homonucleares e heteronucleares; ordem, energia e comprimento de ligação; ligações σ e π em compostos de coordenação.
- 3) **MÉTODOS CLASSICOS, ELETROANALÍTICOS E ESPECTROSCÓPICOS DE ANÁLISE**
Titulometria, Ácido-base, precipitação, complexação e oxi-redução. Potenciometria, Espectroscopia de absorção molecular.
- 4) **TERMODINÂMICA QUÍMICA**
Princípio Zero: a temperatura; Primeiro princípio: conversão de energia e restrições, calor, trabalho e energia interna, capacidade calorífica, transformações envolvendo gases reais e ideais; termoquímica: Lei de Hess; entalpia associada a diversas transformações; Segundo Princípio: ciclo de Carnot; variações de entropia e energia livre; espontaneidade e equilíbrio. Terceiro Princípio: o zero absoluto; potencial químico; soluções e diagramas de fase.
- 5) **CINÉTICA QUÍMICA**
Velocidade de reação; equação de velocidade; teoria de colisões; complexo ativado; mecanismos de reação. Catálise.
- 6) **NOMENCLATURA, PROPRIEDADES FÍSICAS E REAÇÕES DE COMPOSTOS ORGÂNICOS**
Classificação; nomenclatura; isomeria; propriedades físicas e principais reações de hidrocarbonetos alifáticos; hidrocarbonetos aromáticos; álcoois; éteres; aldeídos; cetonas; ácidos carboxílicos; ésteres; aminas e amidas.

7) ESTEREOQUÍMICA ORGÂNICA

Isomeria espacial; termos fundamentais em estereoquímica; classificação de estereoisômeros; atividade óptica; nomenclatura *cis/trans*, E/Z e R/S.

8) IDENTIFICAÇÃO DE COMPOSTOS ORGÂNICOS POR MÉTODOS ESPECTROSCÓPICOS: IV, EM e RMN

Infravermelho (IV): Aspectos gerais, modos de vibrações moleculares, frequências de absorções características de grupamentos em moléculas orgânicas, utilização do espectro de IV na determinação de estrutura de compostos orgânicos. Espectrometria de massas: Aspectos gerais, espectro de massas, determinação da massa molar, regras de fragmentação, alguns padrões de fragmentação, utilização do espectro de massas na determinação de estrutura de compostos orgânicos. Ressonância magnética nuclear de hidrogênio: Aspectos gerais, deslocamentos químicos, integração dos sinais, acoplamento spin-spin, constante de acoplamento, utilização do espectro de RMN ¹H na determinação de estrutura de compostos orgânicos. RMN de ¹³C: Aspectos gerais; deslocamentos químicos; espectros de RMN ¹³C totalmente acoplado e desacoplado; DEPT; utilização do espectro de RMN ¹³C na determinação de estrutura de compostos orgânicos.

BIBLIOGRAFIA RECOMENDADA:

1. ATKINS, P. W.; JONES, L. *Princípios de Química*. Porto Alegre: Bookman, 2001.
2. ATKINS, P. W. *Físico-Química*, 8. ed. Rio de Janeiro: LTC Editora, vol. 1 e 2, 2007.
3. BALL, D. W. *Físico-Química*, São Paulo: Pioneira Thomson Learning, vol. 1, 2005.
4. BROWN, T. L.; LEMAY, JR. H. E.; BURSTEN, B. E. *Química: a ciência central*, 9. ed. Rio de Janeiro: LTC Editora, 2005.
5. HUHEEY, J.E., *Inorganic Chemistry Principles of Structure and Reativity*, 4. ed., Harper Collins Publispers, 1993.
6. HARRIS, D. C. *Análise Química Quantitativa*, 7. ed, Rio de Janeiro: LTC Editora, 2008.
7. LEE, J.D., *Química Inorgânica não tão Concisa*, 5. ed. São Paulo: Edgard Blücher Ltda, 1999.
8. MORRISON, R. T.; BOYD, R. N. *Química Orgânica*, 14. ed. Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 2005.
9. PAVIA, D.L.; LAMPMAN, G.M.; KRIZ, G.S. *Introduction to spectroscopy*. 3. ed. Philadelphia: Harcourt Brace College Publishers, 2001.
10. SILVERSTEIN, R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLE, D. J. *Identificação espectrométrica de compostos orgânicos*, 7. ed. Rio de Janeiro: LTC Editora, 2006.
11. SKOOG, D. A.; HOLLER, F. J.; NIEMAN, T. A. *Princípios de Análise Instrumental*, 5. ed. Porto Alegre: Bookman, 2002.
12. SKOOG, D. A.; WEST, D. M.; HOLLER, F. J.; CROUCH, s. r. *Fundamentos de Química Analítica*. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2006. 999 p.
13. SOLOMONS, T. W. G.; FRHYLE, C. B. *Química Orgânica*, 8. ed. Rio de Janeiro: LTC Editora, vol. 1 e 2, 2005.

