

Governo do Estado do Rio de Janeiro Secretaria de Estado de Ciência, Tecnologia e Inovação Universidade do Estado do Rio de Janeiro

# CENTRO DE TECNOLOGIA E CIÊNCIAS INSTITUTO DE QUÍMICA

#### ANEXO I

#### PROGRAMA DO CONCURSO PÚBLICO PARA PROVIMENTO DO CARGO DE PROFESSOR

# I: EQUILÍBRIO QUÍMICO

Equilíbrio químico. Tipos de equilíbrio. Constantes de equilíbrio para dissociação ou combinação de espécies. Princípio de Le Chatelier. Efeito do íon comum. Efeito de eletrólitos no equilíbrio químico. Atividade e coeficiente de atividade. Teoria de Debye-Hückel. Equações de balanço de massas e de cargas.

# II: EQUILÍBRIO ÁCIDO-BASE

Teorias ácido-base. Autoionização da água. Escala de pH e pOH. Ácidos e bases fortes. Ácidos e bases fracos. Diagrama do logaritmo da concentração: método gráfico. Zona de predominância das espécies em função do pH. Cálculo da constante de equilíbrio (Kc) e do pH de equilíbrio. Sais. Solução tampão. Preparo de soluções tampão. Capacidade tamponante. Titulações de neutralização. Erro de titulação. Indicadores ácido-base.

# III: REAÇÕES DE PRECIPITAÇÃO

Produto de solubilidade e solubilidade molar. Efeito do íon comum. Efeito salino. Produto iônico. Diagrama do logaritmo da concentração. Precipitação quantitativa. Precipitação fracionada. Influência do pH nas reações de precipitação. Cálculo de Kc para as reações de solubilização. Titulação por precipitação. Indicadores (Métodos de Mohr, Fajans e Volhard).

# IV: REAÇÕES DE COMPLEXAÇÃO

Reações de complexação. Constante de formação. Frações das espécies dissociadas de complexos poliligantes. Zona de predominância das espécies em função do logaritmo da concentração de ligante. Previsão da ocorrência de reações de complexação: cálculo de Kc. Influência do pH nas reações de complexação. Dissolução de precipitados pela formação de complexos. Titulação por complexação. Indicadores metalocrômicos.

# V: REAÇÕES DE OXIRREDUÇÃO

Reações de oxidação-redução. Potencial de meia-célula. Células eletroquímicas. Equação de Nernst. Cálculo da constante de equilíbrio (Kc). Titulações de oxirredução. Titulação simétrica e assimétrica. Indicadores de oxirredução.

#### VI: GRAVIMETRIA

Análise gravimétrica. Gravimetria por precipitação. Tipos de precipitados. Técnica da precipitação lenta. Etapas da gravimetria por precipitação. Contaminação dos precipitados. Tipos de agentes precipitantes. Fator gravimétrico. Gravimetria de volatilização.

# VII: TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS E CARACTERIZAÇÃO DE MATERIAIS

# a) Espectroscopia no infravermelho

Teoria da espectroscopia de absorção no infravermelho. Absorção de radiação associada a vibrações moleculares, modos fundamentais, harmônicos e combinações. Osciladores harmônicos e anarmônicos, seleção de transições (regras de seleção). Técnicas experimentais: transmissão, reflexão, espectroscopia de refletância total atenuada (ATR), espectroscopia de refletância difusa no infravermelho com



#### Governo do Estado do Rio de Janeiro Secretaria de Estado de Ciência, Tecnologia e Inovação Universidade do Estado do Rio de Janeiro

transformada de Fourier (DRIFTS). Espectroscopia com intensificação de superfície. Instrumentação: fontes, interferômetros, detectores, sensibilidade e limites de detecção. Espectrômetros baseados em transformada de Fourier. Preparo de amostras em diferentes modos de análise. Aplicações em identificação de compostos, caracterização de materiais e superfícies. Uso de moléculas sonda para caracterização de materiais e acompanhamento de reações.

# b) Espectroscopia eletrônica (UV-Vis)

Princípios da espectroscopia eletrônica de absorção. Espectros eletrônicos moleculares. Transmitância e absorvância. Lei de Beer-Lambert: fundamentos, limitações e desvios. Transições eletrônicas: permitidas e proibidas. Instrumentação: fontes de xenônio, deutério e tungstênio, monocromadores, cubetas, detectores fotomultiplicadores e de estado sólido. Modos de operação: varredura espectral, arranjos de diodo. Determinação quantitativa. Curva analítica. Aplicação da espectroscopia por reflectância difusa no UV-Vis à caracterização de sólidos.

# c) Espectroscopia Raman

Fundamentos da espectroscopia Raman. Espalhamento elástico (Rayleigh) e inelástico (Raman). Teoria da polarizabilidade molecular. Diferenças e complementaridade com infravermelho. Instrumentação: lasers, monocromadores, filtros, detectores CCD. Raman ressonante, SERS (espalhamento Raman intensificado em superfícies), TERS (espectroscopia Raman intensificada por ponta). Caracterização de materiais sólidos.

#### d) Espectroscopia de fluorescência de Raios X

Fundamentos da espectroscopia de fluorescência de Raio X. Vantagens e desvantagens. Instrumentos: dispersão de energia e dispersão de comprimento de onda. Aplicações em análise qualitativa: efeitos de matriz, métodos de calibração.

#### e) Difração de raios-X

Fundamentos teóricos. Conceitos de espalhamento e lei de Bragg. Instrumentação básica. Identificação de fases cristalinas, grau de cristalinidade e parâmetros estruturais. Aplicações: determinação de cristalinidade, tamanho médio de cristalito, parâmetros de cela unitária.

# f) Métodos térmicos

Métodos Termogravimétricos. Termogravimetria (TG). Análise Térmica Diferencial (DTA). Calorimetria Exploratória Diferencial (DSC). Aplicações. Redução à temperatura programada. Oxidação à temperatura programada. Dessorção à temperatura programada de moléculas sonda: caracterização de acidez, basicidade e função hidro-desidrogenante. Quimissorção de moléculas sonda.

#### g) Análise textural

Adsorção física. Principais adsorbatos. Caracterização de sólidos não porosos, micro, meso e macroporosos. Isotermas de fisissorção: avaliação qualitativa e quantitativa. Área específica. Volume de microporos. Volume de mesoporos. Distribuição de tamanho de poros.



#### Governo do Estado do Rio de Janeiro Secretaria de Estado de Ciência, Tecnologia e Inovação Universidade do Estado do Rio de Janeiro

#### **BIBLIOGRAFIA**

SKOOG, D. A.; WEST, D. M.; HOLLER, F. J.; CROUCH, S. R. Fundamentos de Química Analítica. São Paulo: Cengage Learning, 2015.

SKOOG, D. A.; HOLLER, F. J.; CROUCH, S. R. *Princípios de Análise Instrumental*. 7. ed. São Paulo: Cengage Learning, 2018.

HARRIS, D. C. Análise Química Quantitativa. 9. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2021.

VOGEL, A. I. *Análise Química Analítica Quantitativa*. 6. ed. Rio de Janeiro: LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora Ltda., 2002.

BUTTLER, J. N. *Ionic Equilibrium: Solubility and pH Calculations*. New York: John Wiley & Sons, 1998.

MENDHAM, J. et al. Vogel: Análise Química Quantitativa. 6. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2002.

SALA, O. Fundamentos da Espectroscopia Raman e no Infravermelho. 2. ed. São Paulo: Editora UNESP, 1996.

KUMAR, C. S. S. R. (ed.). *UV-Vis and Photoluminescence Spectroscopy for Nanomaterials Characterization*. Berlin; Heidelberg: Springer, 2013. ISBN 978-3-642-27594-4.

SALZER, R.; SIESLER, H. W. (eds.). *Infrared and Raman Spectroscopic Imaging*. 2. ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2014. ISBN 978-3-527-33652-4.

GOLDSTEIN, J. I.; NEWBURY, D. E.; MICHAEL, J. R.; LYMAN, C. E.; ECHLIN, P.; LIFSHIN, E.; SAWYER, L.; JOY, D. C. *Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis*. 3. ed. New York: Springer, 2003. ISBN 978-1461349693.