

## ANEXO I DO EDITAL Nº 252/2024-PRH

**CENTRO DE TECNOLOGIA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA**

### **(72) Termodinâmica Teórica Aplicada em Engenharia Química**

#### **CONTEÚDO PROGRAMÁTICO**

1. Funções de partição (Microcanônica, Canônica, Grande Canônica). Hipóteses de Gibbs, noções de ensemble, relação com a termodinâmica clássica (leis da termodinâmica). Visão microscópica da energia e da entropia. Flutuações.
2. Propriedades termodinâmicas em diferentes ensembles. Transformadas de Legendre. Distribuições de Boltzmann, Fermi-Dirac e Bose-Einstein. Funções de partição semiclássicas. Distribuição de Maxwell-Boltzmann.
3. Métodos de Monte Carlo e de dinâmica molecular em diferentes ensembles. Funções de Correlação. Condições de contorno periódicas. Forças de curto alcance e longo alcance. Campos de força. Cálculo de coeficientes de transporte (difusão e viscosidade). Cálculo de energia livre. Cálculo de energia de solvatação.
4. Termodinâmica estatística de redes: aproximação de Bragg-Williams, aproximação de Guggenheim, modelo de Flory-Huggins (soluções poliméricas). Funções de correlação. Função de distribuição radial e teoria de perturbação. Equações de estado tipo SAFT e CPA.
5. Diagramas de fases e algoritmo de estabilidade. Ponto críticos, caracterização e algoritmos de cálculo.
6. Fundamentos de Química Quântica e de Teoria do Funcional da Densidade (DFT): Equação de Schrödinger e princípio variacional
7. Fundamentos de Química Computacional: determinação de campos de força; métodos de estrutura eletrônica; métodos de correlação eletrônica; conjuntos de base; métodos de valência.

#### **REFERÊNCIAS**

- Allen, M.P. e Tildesley, D.S. (2017) Computer Simulation of Liquids. Oxford Science Publications. ISBN: 978-0-19-880319-5.
- Frenkel, D. and Smit, B. "Understand Molecular Simulations, From Algorithm to Applications Academic Press (2023). ISBN-10: 0323902928.
- McQuarrie, D.A., Statistical Mechanics, Harper and Row Publishers, New York, 2000. ISBN-10: 1891389157.
- Azevedo, E. G., Termodinâmica Aplicada (4a Edição), Escolar Editora, Lisboa, 2018. ISBN-10: 9725925416.
- Levine, I. Quantum Chemistry. Pearson, 2014. ISBN-10: 0205127703.
- Van Santen, R.A.; Neurock. M. Molecular Heterogeneous Catalysis: A Conceptual and Computational Approach. Wiley, 2006. ISBN-10: 352729662X.
- Jensen, F. Introduction to Computational Chemistry. Wiley, 2017. ISBN-10: 1118825993.
- Koch. W.; Holthausen, M.C. A Chemist's Guide to Density Functional Theory. Wiley, 2001. ISBN-10: 3527303723.

### **AVALIAÇÃO DA PROVA ESCRITA**

<b>CRITÉRIOS/QUESITOS</b> <b>1- APRESENTAÇÃO</b> a) Introdução b) Desenvolvimento c) Conclusão	<b>Até 2 pontos</b>
--	---------------------

<b>2- CONTEÚDO</b> a) Desenvolvimento do tópico b) Organização c) Coerência e adequação d) Nível de aprofundamento	<b>Até 6 pontos</b>
<b>3- LINGUAGEM</b> a) Uso adequado da terminologia técnica b) Propriedade c) Clareza d) Precisão e) Referências bibliográficas	<b>Até 2 pontos</b>

**Orientação: são atribuídas as pontuações somente aos itens 1, 2 e 3**

### AVALIAÇÃO DA PROVA DIDÁTICA

CRITÉRIOS/QUESITOS	
<b>1- Plano de aula</b> - Adequação dos objetivos ao tópico - Dados essenciais do conteúdo - Adequação dos procedimentos e recursos didáticos - Indicação do referencial bibliográfico adequado e atual sobre o tópico da aula	<b>Até 2 pontos</b>
<b>2- Parte expositiva</b>	<b>Até 6 pontos</b>
<b>a) Conteúdo:</b> - Apresentação e problematização - Desenvolvimento sequencial - Articulação do conteúdo com o tópico - Cumprimento dos objetivos - Exatidão e atualidade - Síntese analítica	
<b>b) Exposição:</b> - Consistência argumentativa (contextualização, questionamentos, exemplificações, dados, informações) - Adequação do material didático ao conteúdo - Clareza, objetividade e comunicabilidade - Linguagem: adequação, com correção, fluência e dicção - Adequação ao tempo disponível	
<b>c) Uso de recursos:</b> - Adequação dos materiais - Uso adequado dos recursos	
<b>3- Arguição</b>	<b>Até 2 pontos</b>
<b>a) Conhecimento:</b> - Nível de conhecimento geral e específico - Informações corretas - Atualidade de informações <b>b) Comunicação e linguagem:</b> - Clareza e objetividade - Relação com as áreas correlatas - Argumentação segura	

**Orientação: são atribuídas as pontuações somente aos itens 1, 2 e 3**

A prova específica consistirá na análise do documento projeto de atividades acadêmicas (apresentado pelo candidato no ato da inscrição) e de sua defesa pública.

O documento referente ao projeto de atividades acadêmicas, contemplando ensino, pesquisa e extensão, de sua autoria, em forma digital, *pdf*, não deve exceder 25 páginas.

A defesa pública será constituída de avaliação, mediante exposição e arguições orais, do projeto de atividades acadêmicas (ver descrição). O candidato terá no máximo 30 (trinta) minutos para exposição oral de seu projeto de atividades acadêmicas. Cada examinador terá 5 (cinco) minutos, no máximo, para arguir o candidato, o qual disporá de tempo idêntico para a sua manifestação, sendo que o total da arguição não poderá ultrapassar 60 (sessenta) minutos, incluído o tempo de exposição do candidato.

A Comissão Julgadora avaliará o domínio do conhecimento e aptidão do candidato na área do concurso, com base nos seguintes aspectos:

a) pertinência e adequação do conteúdo a ser proposto para o ensino de graduação, extensão universitária e pós-graduação;

d) pertinência e relevância das atividades de extensão e sua aderência às demais atividades acadêmicas do Departamento de Engenharia Química;

b) pertinência, relevância, originalidade e exequibilidade do projeto de pesquisa proposto e sua aderência à área de pesquisa em **TERMODINÂMICA TEÓRICA APLICADA À ENGENHARIA QUÍMICA**;

O projeto de atividades acadêmicas em **Projeto de Atividades Acadêmicas em Simulação Molecular aplicada à Engenharia Química**.

deve ser elaborado de tal maneira a contemplar os seguintes itens:

1) Descrição das atividades no ensino de graduação e pós-graduação, abordando metodologias ativas, em até duas páginas;

2) Descrição das atividades de extensão em até duas páginas;

3) Projeto de pesquisa original, ousado e competitivo internacionalmente, contendo:

3.1) Apresentação dos desafios de pesquisa formulados e situados frente ao estado da arte e à literatura existente;

3.2) Metodologia adequada e bem justificada;

3.3) Indicação de quais avanços os resultados da pesquisa trariam para a área de conhecimento em que se insere, se bem-sucedido;

3.4) Descrição de como os resultados propostos da pesquisa possibilitariam a expansão de forma significativa da fronteira do conhecimento na área do concurso;

3.5) Indicação de até 5 artigos publicados pelo candidato relacionados ao tema do projeto de pesquisa proposto.

Cada examinador atribuirá nota de 0 (zero) a 10 (dez) ao projeto de atividades acadêmicas, sendo composta pelos seguintes itens:

1-) Nota 3,0, no máximo, atribuída ao documento escrito do projeto de atividades acadêmicas;

2-) Nota 3,0, no máximo, atribuída à exposição oral do projeto de atividades acadêmicas;

3-) Nota 4,0, no máximo, atribuída à arguição do candidato.

A nota final do projeto de atividades acadêmicas será calculada pela média aritmética das notas atribuídas pelos examinadores.

## AVALIAÇÃO DE TÍTULOS E CURRÍCULO

<b>TABELA DE PONTUAÇÃO</b>	
<b>I - FORMAÇÃO ACADÊMICA/TITULAÇÃO NA ÁREA DO CONCURSO</b> <b>(máximo de 100 pontos)</b>	
Doutorado na área do concurso e/ou aprovação de tese de Livre Docência	<b>100</b>
Créditos completos de doutorado, com aprovação na qualificação, na área do concurso	<b>75</b>
Mestrado na área do concurso	<b>50</b>
<b>OBS: Será considerado apenas o título na área do concurso e com a maior pontuação.</b>	
<b>II - ATIVIDADES ACADÊMICAS</b> <b>(máximo de 600)</b> <b>Pontuação por obra ou atividade</b>	

<b>1- Artigos Publicados, indexados ao Qualis, na área do concurso nos últimos 05 anos</b>	
Qualis A1 com até 4 autores	25
Qualis A1 com 5 a 6 autores	23,75
Qualis A1 com 7 a 8 autores	22,5
Qualis A1 acima de 8 autores	21,25
Qualis A2 com até 4 autores	20
Qualis A2 com 5 a 6 autores	18,75
Qualis A2 com 7 a 8 autores	18,25
Qualis A2 acima de 8 autores	17,88
Qualis A3 com até 4 autores	17,5
Qualis A3 com 5 a 6 autores	16,25
Qualis A3 com 7 a 8 autores	15,75
Qualis A3 acima de 8 autores	15,38
Qualis A4 com até 4 autores	15
Qualis A4 com 5 a 6 autores	13,75
Qualis A4 com 7 a 8 autores	13,25
Qualis A4 acima de 8 autores	12,88
Qualis B1 com até 4 autores	12,5
Qualis B1 com 5 a 6 autores	12
Qualis B1 com 7 a 8 autores	11,75
Qualis B1 acima de 8 autores	11,5
Qualis B2 com até 4 autores	11,25
Qualis B2 com 5 a 6 autores	10,75
Qualis B2 com 7 a 8 autores	10,5
Qualis B2 acima de 8 autores	10,25
Qualis B3 com até 4 autores	10
Qualis B3 com 5 a 6 autores	9,5
Qualis B3 com 7 a 8 autores	9,25
Qualis B3 acima de 8 autores	9
Qualis B4 com até 4 autores	8,75
Qualis B4 com 5 a 6 autores	7,5
Qualis B4 com 7 a 8 autores	5
Qualis B4 acima de 8 autores	2,5
Qualis C	1
<b>2- Livros de interesse na área publicados no exterior com ISBN e com corpo editorial nos últimos cinco anos</b>	
Autor	25
Autor de capítulo	12,5
Tradutor/revisor técnico	6,25
Coordenador/organizador	6,25
Editor	3,75
<b>3- Livros de interesse na área, publicados no Brasil, com ISBN e com corpo editorial nos últimos cinco anos</b>	
Autor	20
Autor de capítulo	10
Tradutor/revisor técnico	3,75
Coordenador/organizador	3,75
Editor	2,5
<b>4- Livros de interesse na área nos últimos 05 anos</b>	
Autor	5
Autor de capítulo	3
Tradutor/revisor técnico	1
Coordenador/organizador	1
Editor	1
Livros que não se enquadram nos itens acima	1
<b>5- Orientações concluídas - pontuação por ocorrência nos últimos cinco anos</b>	
Doutorado	20
Supervisão de Estágio Pós-Doutoral	12,5

Mestrado	12,5
Especialização	3,75
Iniciação científica, tecnológica, extensão e ensino	3,75
Graduação (trabalho de conclusão, estágio, monitoria)	1,25
Residência	3,75
<i>OBS: Para as coorientações, deve ser computada a metade dos pontos.</i>	
<b>6- Projetos de ensino, pesquisa ou extensão nos últimos cinco anos - pontuação por ano de realização</b>	
Coordenação de projetos aprovados e/ou financiados por agências ou órgãos governamentais ou não	5
Participação em projetos aprovados e/ou financiados por agências ou órgãos governamentais ou não	2,5
Coordenação de projetos aprovados institucionalmente em andamento ou concluídos	1,25
Participação em projetos aprovados institucionalmente em andamento ou concluídos	0,5
<b>7- Bancas e comissões julgadoras nos últimos 05 anos</b>	
Doutorado (não pontuar quando for o orientador)	2,5
Mestrado (não pontuar quando for o orientador)	1,5
Especialização (não pontuar quando for o orientador)	0,50
Graduação (não pontuar quando for o orientador)	0,25
Concurso público, teste seletivo	1,00
<b>8- Participação em eventos científicos na área do teste seletivo nos últimos 05 anos</b>	
Coordenação de evento nacional ou internacional	8,75
Coordenação de evento regional ou local	3,75
Palestrante de evento internacional ou nacional	5
Palestrante de evento regional ou local	1,25
Ministrante de mini curso	1,25
Apresentação de trabalho científico, com publicação de texto completo em anais de eventos nacionais ou internacionais	2,5
Apresentação de trabalho científico, com publicação de texto completo em anais de eventos regionais ou estaduais	0,5
Apresentação de trabalho científico, com publicação de resumo em anais de eventos nacionais ou internacionais	0,25
Apresentação de trabalho científico, com publicação de resumo em anais de eventos regionais ou estaduais	0,13
Participação em evento	0,08
<b>9- Produção artística / cultural / didática na área nos últimos cinco anos</b>	
Produção de material audiovisual: vídeos, CD's, DVD's e Portfólios	5
Montagem, curadoria, organização de eventos, direção de espetáculos (musicais, peças teatrais, danças e artes visuais) apresentada ao público em eventos reconhecidos como de abrangência internacional	10
Montagem, curadoria, organização de eventos, direção de espetáculos (musicais, peças teatrais, danças e artes visuais) apresentada ao público em eventos reconhecidos como de abrangência nacional	8,75
Montagem, curadoria, organização de eventos, direção de espetáculos (musicais, peças teatrais, danças e artes visuais) apresentada ao público em eventos reconhecidos como de abrangência local	4,5
Atuação como intérprete em eventos artísticos (de música, artes cênicas e artes visuais), em âmbito internacional.	10
Atuação como intérprete em eventos artísticos (de música, artes cênicas e artes visuais), em âmbito nacional	5
Autoria de obras artísticas (música, artes cênicas e artes visuais) apresentadas publicamente em âmbito internacional	10
Autoria de obras artísticas (música, artes cênicas e artes visuais) apresentadas publicamente em âmbito nacional	5
<b>10- Produção técnica na área nos últimos cinco anos</b>	
Licenciamento de patentes de produtos e processos	37,5
Depósito de patentes de produtos e de processos	25

Registro de Software	37,5
Pedido de registro de <i>software</i>	25
Produção de material audiovisual relevante na área, aprovado e financiado por instituições de ensino e de pesquisa	10
Produção de material audiovisual relevante na área sem financiamento	5
<b>11- Prêmios e Títulos nos últimos cinco anos</b>	
Prêmios, distinções e láureas outorgados por entidades científicas, acadêmicas ou artísticas	5
<b>III – EXPERIÊNCIA PROFISSIONAL (máximo de 300 pontos)</b>	
<b>1- Magistério nos últimos cinco anos / Pontuação por semestre</b>	
Magistério em curso de pós-graduação stricto sensu	15
Magistério em curso de pós-graduação lato sensu	12,5
Magistério em curso de graduação	10
Magistério no ensino fundamental, médio e técnico	5
Magistério em curso de treinamento ou extensão	2,5
Cursos não curriculares ministrados na especialidade, com carga horária acima de 40h/a	1,5
<b>2- Atividades administrativas nos últimos cinco anos</b>	
<b>2.1- Pontuação por atividade</b>	
Coordenação de curso de pós-graduação stricto sensu	40
Coordenação de curso de pós-graduação lato sensu	10
Coordenação de curso de graduação	40
Participação em Conselhos Superiores (não cumulativa com coordenação de curso)	5
Participação em atividades administrativas de Instituições de Ensino Superior (chefia, diretoria de unidades, pró-reitorias, etc.)	20
Participação em Núcleo Docente Estruturante e/ou Conselho Acadêmico de curso de graduação	5
Coordenação de comissões e/ou comitês de órgãos de fomento e/ou de avaliação/regulação	10
<b>2.2- Experiência profissional na área nos últimos cinco anos (Pontuação por ano)</b>	
Experiência profissional na área da seleção, comprovada em carteira profissional ou equivalente	5
<b>3- Aprovação em concurso</b>	
3. Aprovação em concurso público para o magistério superior nos últimos cinco anos (por aprovação)	1,5
<b>TOTAL DE PONTOS DA AVALIAÇÃO DE TÍTULOS E CURRÍCULO = 1000 PONTOS</b>	
<b>TOTAL DE PONTOS DO CANDIDATO = SOMA DOS ITENS I, II e III</b>	
<b>NOTA FINAL ATRIBUÍDA PELA BANCA EXAMINADORA AO CANDIDATO = TOTAL DE PONTOS DIVIDIDO POR 100</b>	
<b>Observação:</b> a autoatribuição de pontuação pelo candidato não vincula a Banca Examinadora, que pode concluir por pontuação diversa daquela atribuída pelo candidato, caso entenda que os documentos por ele apresentados não correspondem às hipóteses por ele sugeridas quando do preenchimento do presente formulário.	