UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO

Centro de Ciências Exatas e Tecnologia

Coordenadoria do Programa de Pós-Graduação em Química

Avenida dos Portugueses, s/n – Bacanga – 65.085-580 São Luís (MA)

Fone: (98) 3301 8246 - cpgquim@ufma.br - www.ppgquim.ufma.br

EXAME DE SELEÇÃO – 1º SEMESTRE DE 2012

1. 0,596 g de um composto gasoso constituído de Boro (MM=10,81g Mol^{-1}) e hidrogênio (MM=1,0 g Mol^{-1}) ocupa um volume de 0,484 L nas CNTP. Quando o composto é queimado em excesso de oxigênio O_2 (MM=16,0 g Mol^{-1}), todo seu hidrogênio é recuperado em 1,17 g de água (H_2O) e o Boro é transformado totalmente em B_2O_3. Com base nessas informações responda:

(a) Qual é a fórmula empírica, a fórmula molecular e a massa molar do compósto de Boro-Hidrogênio? Use R=0,082 atm mol^{-1} K^{-1} L^{-1} e P = 1,0 atm.

(b) Qual é a massa de B_2O_3 produzido na combustão?

2. Abaixo é apresentada a equação para um gás ideal e a equação de Van der Walls para um gás dito real. Analise as duas equações dadas e responda:

Gás ideal: $PV = nRT$

Gás de Van der Walls: $\left(P + \frac{a}{V_M}\right)(V_M - b) = RT$; Onde V_M corresponde ao volume molar

(a) Explicar por que são introduzidas as constantes a e b.

(b) Qual o significado destas constantes?

3. O ácido nítrico aquoso (HNO_3) comercial tem densidade de 1,42 g/mL e possuí uma concentração igual 16 $mol.L^{-1}$. Com base nas informações dadas, calcule a porcentagem em massa de HNO_3 na solução comercial.

4. A 500 K a reação:

$$PCl_{5\,(g)} \rightleftharpoons PCl_{3\,(g)} + Cl_{2\,(g)}$$

Possuí uma constante de equilíbrio ($K_{eq.}$) é igual a 0,497. Em uma mistura de equilíbrio a 500 K, a pressão de PCl_5 é igual a 0,86 bar a pressão parcial de PCl_3 é igual a 0,350 bar. Qual a pressão parcial de Cl_2 na mistura no equilíbrio.

5. Para o processo elementar :

$$N_2O_{5\,(g)} \longrightarrow NO_{2\,(g)} + NO_{3\,(g)} \qquad \Delta H = 91{,}3\ kJmol^{-1}$$

A energia de ativação ($\mathbf{E_a}$) do processo é igual a 154 kJ/mol e a variação de energia total (**ΔE**) é igual a 136 kJ/mol. Com base nessas informações responde as questões (a), (b) e (c) abaixo.

(a) Esboce o perfil de energia para essa reação e represente a E_a e a ΔE.

(b) Se utilizasse-mos um catalisador apropriado para a reação dada acima o perfil de energia em (a) seria maior ou menor quando comparado com o processo sem o catalisador? Explique.

(c) Qual é a energia de ativação para a reação inversa?

6. No Brasil, a produção de H_2 a partir do metano é interessante em função das grandes reservas de gás natural existentes. Como o H_2 hoje pode ser gerado a partir do gás de síntese, produtores estão sempre tentando achar caminhos para se obter mais H_2. Isto pode ser possível, pela remoção do CO do gás de síntese por meio da reação de deslocamento da água onde o monóxido de carbono reage com vapor de água gerando CO_2 e H_2:

$$CO_g + H_2O_g \rightleftharpoons CO_{2g} + H_{2g}$$

Justifique, por meio de cálculos termodinâmicos, se esta reação é ou não espontânea.
Dados de Energia livre de formação (ΔG_f^o), em kJ/mol:

$$CO_{(g)} = -137{,}15;\ CO_{2\,(g)} = -394{,}37;\ H_{2\,(g)} = 0;\ H_2O_{\,(g)} = -228{,}59;$$

7. Dado o conjunto dos números quânticos abaixo, indique e justifique qual ou quais não pode(m) existir para um átomo. Onde, n, ℓ, $m\ell$ e m_s são os números quânticos principal, secundário, magnético e spin, respectivamente.

a) n = 4, ℓ = 1, $m\ell$ = -1, m_s = +1/2

b) n = 2, ℓ = 3, $m\ell$ = -2, m_s = +1/2

c) n = 3, ℓ = 1, $m\ell$ = 2, m_s = -1/2

d) n = 5, ℓ = 2, $m\ell$ = -1, m_s =-1/2

8. Se o raio covalente diminui no sentido do átomo de Berílio (Be) para o átomo de Boro (B) por que a energia de ionização do **B** é menor do que a do **Be**, como indicado na tabela abaixo.

Elemento	$_4$Be	$_5$B
Raio Covante (Å)	0,90	0,82
Energia de Ionização ($kJmol^{-1}$)	899	801

9. Abaixo é apresentada à notação de uma Célula Eletroquímica envolvendo um eletrodo de chumbo (Pb) e um eletrodo de prata (Ag) a 298 K. Com base no respectivo potencial padrão para cada eletrodo (E°), responda as questões abaixo.

$$Pb|Pb^{+2}\ (a=1)\ ||\ Ag^{+}\ (a=1)\ |Ag$$

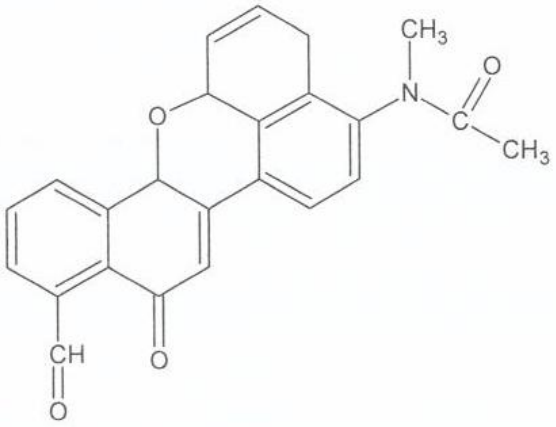
$$E°_{Pb} = -0{,}126\ V \text{ e } E°_{Ag} = 0{,}799\ V$$

(a) Escrever as semi-reações dos eletrodos e a reação global da célula eletroquímica;
(b) Calcular a força eletromotriz (FEM) da célula eletroquímica;
(c) Calcular a variação da Energia Livre (ΔG°) da célula eletroquímica;

(d) Calcular a constante de equilíbrio (K) da célula eletroquímica.

Dados: $F = 96.500\ C\ Mol^{-1}$ e $R = 8{,}314\ J\ mol^{-1}\ K^{-1}$.

10. Com base no composto abaixo responda as questões pedidas:

(a) Quais as funções orgânicas presentes?

(b) Quais os tipos de orbitais envolvidos nas ligações carbono-nitrogênio?