



PROVA DA SELEÇÃO DO CURSO DE MESTRADO EM QUÍMICA

1º SEMESTRE DE 2018

19/02/2018

- 1) Os **superactinídeos** ou também **ubiunídeos** são os elementos químicos ainda não descobertos (sintetizados) e cujos números atômicos vão de 121 (unbiunium) até 153 (Unpentrium). A existência teórica dos superactinídeos foi sugerida por Glenn Theodore Seaborg, laureado com o Prêmio Nobel de Química de 1951. Os superactinídeos teriam uma meia-vida extremamente curta, embora o elemento 126 esteja dentro de uma hipotética “ilha de estabilidade” (número mágico no modelo de camadas do núcleo). Para os superactinídeos prevê-se que as camadas eletrônicas $7d_{3/2}$, $8p_{1/2}$, $6f_{5/2}$ e $5g_{7/2}$ seriam preenchidas simultaneamente de forma a tornar difícil a previsão das propriedades químicas desses elementos.

(a) Mostre todas as combinações possíveis de números quânticos para um elétron num orbital $5g$ de um superactinídeo.

(b) Explique o porquê da impossibilidade de se ter um orbital $3f$ ou $4g$ em um superactinídeo.

- 2) (a) Apresente a geometria molecular das moléculas de metano (CH_4), amônia (NH_3) e água (H_2O)?
(b) Explique por que as ligações no metano fazem ângulos de $109,5^\circ$, na amônia 107° e na água 105° ?

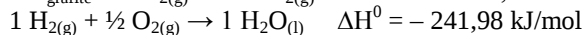
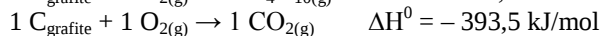
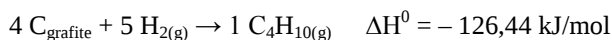
- 3) As constantes de acidez e basicidade são determinadas experimentalmente por meio das medidas das concentrações das espécies em equilíbrio. Por exemplo, para se determinar a constante de ionização (equilíbrio), K_1 , para o ácido acético, prepara-se uma solução de concentração de ácido acético conhecida e a concentração de H^+ ou o pH são determinados por vários métodos. Um método muito usado é baseado em métodos instrumentais de análise usando o medidor de pH. Sabendo que para uma solução $0,100 \text{ mol L}^{-1}$ de ácido acético é encontrado um valor experimental de pH igual 2,88, calcule:

a) O pOH dessa solução;

b) A constante de ionização (K_1) do ácido acético.

- 4) Cálculos renais podem ser formados por oxalato de cálcio, um sal pouco solúvel (CaC_2O_4 , $K_s = 2,6 \times 10^{-9} \text{ mol}^2/\text{L}^2$). A precipitação desse sal no organismo ocorre com o aumento da concentração do íon oxalato no plasma sanguíneo. Considerando um indivíduo hipercalcêmico, cuja concentração de cálcio no plasma é de $0,0030 \text{ mol/L}$, qual deve ser a concentração máxima de oxalato no plasma sanguíneo desse indivíduo, para que não ocorra a formação de cálculos renais?

- 5) Considerando-se o butano, C_4H_{10} , como componente majoritário do gás de cozinha, GLP, e utilizando-se os seguintes dados para entalpias padrão de formação, calcule o calor produzido na combustão de 290,0 g de butano.



- 6) A oxidação do Fe^{2+} pelo O_2 dissolvido em solução, segue a lei de velocidade:

$$-\frac{d[Fe^{2+}]}{dt} = k[Fe^{2+}]^2 P(O_2)$$

Onde $P(O_2)$ representa a pressão em “atm” do oxigênio, k é a constante de velocidade da reação química e $[Fe^{2+}]$ representa a concentração de íons Fe^{2+} em solução. Sabendo que a constante de velocidade da reação é igual a $1,25 \times 10^{-3} \text{ L atm mol}^{-1} \text{ h}^{-1}$ quando a reação ocorre em meio ácido a 25°C , responda:

a) Qual o tempo de meia-vida de uma solução $0,1 \text{ mol L}^{-1}$ de Fe^{2+} , em meio ácido, considerando $P(O_2)$ constante e igual a 0,2 atm?

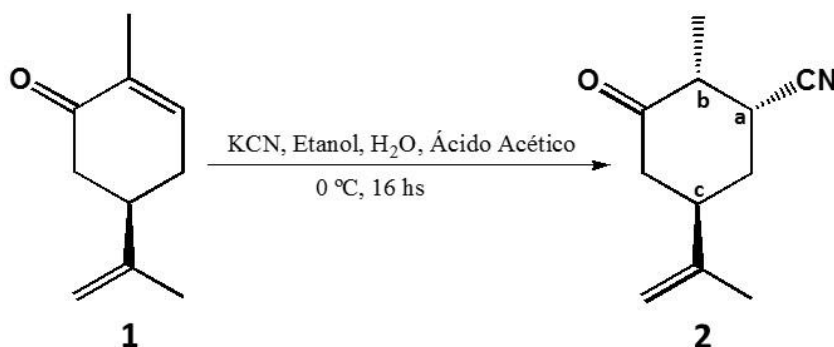
b) Qual o tempo para que a concentração de Fe^{2+} caia em 80 %?



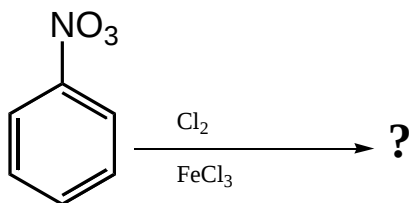
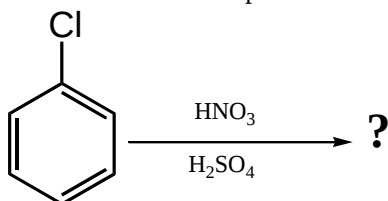
- 7) O “potencial de eletrodo” é definido como o potencial de uma célula na qual o “eletrodo em estudo” é colocado do lado direito e o eletrodo padrão de hidrogênio (EPH) é colocado do lado esquerdo. Dessa forma, o potencial da célula medido reflete o potencial do “eletrodo em estudo”. Por convenção o potencial de eletrodo é designado como potencial de redução. Discorra sobre a espontaneidade de cada um dos equilíbrios apresentados a seguir em relação ao EPH bem como discorra sobre a natureza do “eletrodo em estudo” na célula eletroquímica em relação ao EPH (Se trata de catodo ou anodo?).



- 8) A Carvona é o principal constituinte do óleo de hortelã (*Mentha spicata*) e tem várias aplicações na indústria alimentícia, cosmética e farmacêutica. Estudos recentes demonstraram que alguns derivados sintetizados a partir de um enantiômero da Carvona apresentaram atividade algnagésica expressiva. Um desses derivados é o composto 2. Atribua as configurações *R* ou *S* aos centros estereogênicos **a** e **b** e **c** do composto 2.



- 9) Faça um esboço das energias dos orbitais d com base na Teoria do Campo Cristalino para complexos com geometria tetraédrica e octaédrica. Qual seria a origem física deste desdobramento de níveis de energias, segundo a Teoria do Campo Cristalino?
- 10) Nitroclorobenzenos são intermediários para a síntese de inúmeros compostos de interesse industrial como por exemplo antioxidantes e fármacos utilizados no tratamento da hanseníase. Os nitroclorobenzenos podem ser sintetizados tanto pela nitração do clorobenzeno (reação 1) quanto pela cloração do nitrobenzeno (reação 2)



Escreva o(s) produto(s) formado(s) das reações 1 e 2.