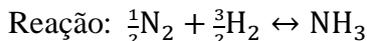


## Processo Seletivo PPGQuim - MESTRADO 2021

Instruções conforme EDITAL AGEUFMA Nº 12/2021 após retificação:

- 1) Nenhum candidato poderá ingressar na sala virtual ou ter acesso ao link para a resolução das questões após o início do tempo de resposta.
- 2) A prova terá duração de 3 horas, após as quais o link será bloqueado pela comissão avaliadora, impedindo a submissão de novas respostas.
- 3) Este formulário contém as questões acompanhadas de campos específicos para o envio das respostas para a comissão.
- 4) Responda a cada questão em folhas sulfite individualmente identificadas, numeradas, datadas e assinadas, utilizando caneta azul ou preta.
- 5) Cada resposta será remetida separadamente em campo apropriado, digitalizada obrigatoriamente em formato PDF com tamanho de arquivo máximo de 100MB.
- 6) Os arquivos deverão ser nomeados com o nome do candidato e o número da questão a que cada um se refere (Exemplo: Questão01.candidatoX.pdf).
- 7) A questão a qual o candidato não souber responder, deverá ser anexada uma folha com os dizeres: **QUESTÃO EM BRANCO**, sendo esta não contabilizada no somatório da nota.
- 8) Os candidatos terão direito a envio do formulário com as respostas em tentativa única e seus endereços de e-mail serão coletados pelo aplicativo como forma de rastreamento digital e registro de hora de entrega do formulário.

1. Em um recipiente fechado com capacidade de 10 litros foram introduzidos 5 mol de gás nitrogênio e 10 mol de gás hidrogênio a temperatura de 27°C. Após uma hora, verificou-se que o equilíbrio químico do sistema foi atingindo e que foram formados 5 mol de gás amônia. Qual é o valor da constante de equilíbrio em função das pressões parciais dos gases ( $K_p$ ) com a mesma temperatura inicial? ( $R = 0,082 \text{ atm L mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ).



2. O benzoato de sódio é um sal do ácido benzóico ( $\text{C}_6\text{H}_5\text{CO}_2$ ) aplicado como conservante e agente antimicrobiano utilizado em refrigerantes, sucos, geléias, margarinas, bebidas, etc.. A partir de uma solução de benzoato de sódio com concentração inicial de  $0,225 \text{ mol L}^{-1}$ . Pede-se:

- I) Escreva a equação da reação de hidrólise do sal e a sua constante de equilíbrio.
- II) Se adicionar um volume de água duas vezes maior à solução de benzoato de sódio, qual será a nova concentração em  $\text{mol L}^{-1}$ .
- III) Se adicionar ácido benzóico até uma concentração de  $0,200 \text{ mol L}^{-1}$  qual o pH da solução tampão formada?

$$\text{Dados: } K_b = 1,59 \times 10^{-10}$$

3. Ao reagir 50,0 mL de uma solução de brometo de sódio (PM 102,89) com excesso de solução de nitrato de prata (PM 169,87) houve a formação de 0,302g de precipitado de brometo de prata (PM 187,77). Qual a concentração solução de brometo de sódio?

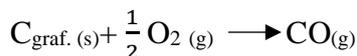
4. Considere um átomo de hidrogênio no vácuo, isolado, sem qualquer interação com outros átomos. Associada a esse átomo, existe uma energia mínima necessária para remover um elétron, na fase gasosa, conhecida como energia de ionização. Especificamente, trata-se aqui de uma transição de um elétron a partir do nível de energia  $n = 1$  até a separação “infinita” do núcleo, ou seja, um afastamento muito grande, que não provoca nenhuma interação entre o átomo e o elétron ( $n = \infty$ ). Com base nessas informações, pede-se:

- a) Qual é a energia mínima que um fóton deve ter para que esse processo de ionização aconteça?
- b) Qual o comprimento de onda dessa radiação?
- c) Em qual região da radiação eletromagnética encontra-se esse fóton?

5. Considere os seguintes compostos de coordenação: (a)  $[\text{CoCl}_2(\text{NH}_3)_4]\text{Cl} \cdot \text{H}_2\text{O}$ ; (b)  $[\text{CoCl}(\text{NH}_3)_5]\text{Br}$ ; (c)  $[\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]$  quadrado planar.

Quais desses compostos apresentam isômeros cis-trans? Se existir a isomeria, desenhe as estruturas e nomeie os compostos.

6. O  $\Delta H$  da reação de 1,0 mol de grafite com 0,5 mol de oxigênio gerando 1,0 mol de monóxido de carbono a 298 K e 1 Bar, é igual a - 110,525 J. Com base nos dados descritos anteriormente calcule a variação de energia ( $\Delta U$ ) da reação. (dado  $R = 8,314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ )



7. A reação de decomposição do íon amônio é dada pela equação descrita abaixo. Com base em sua estequiometria e nos dados da tabela de variação de energia de Gibbs de formação apresentada, calcule a constante de equilíbrio (K) da reação a 298 K. (dado  $R = 8,314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ )



Espécies	$\Delta G_f^\circ$ (kJ mol <sup>-1</sup> )
$\text{NH}_4^+_{(\text{aq})}$	- 79,38
$\text{NH}_3_{(\text{aq})}$	- 26,57
$\text{H}^+_{(\text{aq})}$	0

8. A decomposição do pentóxido de dinitrogênio ( $\text{N}_2\text{O}_5$ ) segue a seguinte reação:



Em um experimento em laboratório foram obtidos os seguintes dados de constante de velocidade em função da temperatura para esta reação. Os resultados foram resumidos na tabela abaixo. Com base nessas informações calcule a energia de ativação do processo ( $E_a$ ) e o fator de frequência para esta reação.

T(K)	273	298	308	318	328	338
k (s <sup>-1</sup> )	$7,87 \times 10^{-7}$	$3,45 \times 10^{-5}$	$1,35 \times 10^{-4}$	$4,98 \times 10^{-4}$	$1,40 \times 10^{-3}$	$4,87 \times 10^{-3}$

9. O desenvolvimento da teoria do orbital molecular foi muito importante, pois permitiu superar algumas falhas deixadas por outras teorias, como o paramagnetismo do oxigênio e a descrição do diborano, um composto deficiente de elétrons. Medidas espectroscópicas associadas a cálculos teóricos mostram que existe uma diferença de distribuição de níveis entre o  $\text{N}_2$  e o  $\text{O}_2$ . As razões estão atreladas a diferenças na energia dos orbitais atômicos 2s e 2p e o quanto eles se sobrepõem. Pensando nisso, pede-se:

a) Desenhe o diagrama de níveis de energia do orbital molecular do  $\text{O}_2$ , nomeando os níveis de energia conforme o tipo de orbital ( $\sigma$  ou  $\pi$ ), dizendo se são ligantes ou antiligantes. Baseado nesse diagrama, explique o paramagnetismo da molécula de  $\text{O}_2$  e calcule a ordem de ligação.

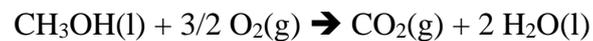
b) O diagrama de níveis de energia do orbital molecular do  $\text{CN}^-$  é similar ao do  $\text{N}_2$ , ou seja, segue a mesma distribuição de energias. Porém, a eletronegatividade diferente do C e N faz com que o orbital atômico mais eletronegativo tenha uma menor energia, fornecendo uma maior contribuição ao orbital

molecular de menor energia. Assim, desenhe o diagrama de níveis de energia do orbital molecular do  $\text{CN}^-$ .

c) Os elétrons têm maior probabilidade de estar no C ou no N? Justifique.

**10.** Dada a equação de combustão do Metanol, responda o que se pede nos itens a seguir:

a) Calcule o rendimento teórico em quilogramas de  $\text{CO}_2$  produzidos na combustão de 1,0 L de metanol (densidade  $0,791 \text{ g/cm}^3$ ). Dados:  $\text{CH}_3\text{OH} = 32,04 \text{ g/mol}$ ;  $\text{CO}_2 = 44,02 \text{ g/mol}$ .



b) A combustão de 1,00 L de octano produz 2,16 Kg de  $\text{CO}_2$ , um valor bem maior do que o emitido pelo metanol. Entretanto, é importante verificar quanto de energia é produzida por litro de combustível. Sendo o  $\Delta H_c^\circ = - 5471 \text{ kJ/mol}$  para o octano e  $\Delta H_c^\circ = - 726 \text{ kJ/mol}$  para o metanol, qual combustível produz mais energia por litro? Dados:  $\text{C}_8\text{H}_{18} = 114,33 \text{ g/mol}$ , densidade =  $0,703 \text{ g/cm}^3$

c) Com base no resultado do item (b), responda: Quanto de metanol é necessário para produzir a mesma energia que o octano por litro? Nesse caso, octano produz mais ou menos  $\text{CO}_2$  que o octano?

É necessário 1,88 L para produzir a mesma energia que o octano, porém o metanol ainda produz menos  $\text{CO}_2$  do que 1 L de octano.

d) Quanto mais volume de metanol, em porcentagem, é necessário em um tanque para que a energia produzida seja a mesma?