



## PROVA DA SELEÇÃO DO CURSO DE DOUTORADO EM QUÍMICA ASSOCIATIVO UFMA-IFMA

### PROVA ESCRITA DISCURSIVA – EDITAL AGEUFMA 98/2021

1) Dê as estruturas e os nomes de cada um dos isômeros dos seguintes complexos:



2) Uma quantidade de 0,50 mol de um gás ideal inicialmente a 300,15 K expande-se de 1,5 L a 15,0 L. Calcule os valores de  $w$ ,  $q$ ,  $\Delta U$ ,  $\Delta S$  e  $\Delta G$  se o processo for realizado isotermicamente e reversivelmente.

3) Para a reação  $\text{A}(\text{g}) \rightarrow 2\text{B}(\text{g})$ , a velocidade inicial,  $V_0$ , do processo foi medida partindo-se de diferentes concentrações iniciais do reagente a 298,15 K, estando os dados experimentais na tabela a seguir.

Experimento	$[\text{A}]_0 / \text{mol L}^{-1}$	$V_0 / \times 10^{-3} \text{mol L}^{-1} \text{s}^{-1}$
I	0,20	2,0
II	0,10	1,0
III	0,40	4,0

Pede-se:

a) Qual o valor da constante de velocidade da reação?  
b) Qual o tempo de meia-vida da reação?  
c) Qual o tempo para que a concentração inicial do experimento I caia 25% do valor inicial?

4) (a) Construa os diagramas de orbitais moleculares para as moléculas de CO e NO, (b) identifique os orbitais moleculares de Fronteira (HOMO - *highest occupied molecular orbital* e LUMO - *lowest unoccupied molecular orbital*).

5) Um pesquisador precisou preparar 0,1 mmol/L de uma solução de ácido acético ( $\text{CH}_3\text{COOH}$ ) para usar num experimento. Sabendo que este ácido possui uma constante de dissociação ácida,  $K_a$ , de aproximadamente  $1,75 \times 10^{-5}$  em água a  $25^\circ\text{C}$  e que a constante de dissociação da água é  $1,0 \times 10^{-14}$ , faça o que se pede:

(a) Escreva a reação de dissociação do ácido acético em água e determine o valor da constante de dissociação básica,  $K_b$ , para a base conjugada, acetato ( $\text{CH}_3\text{COO}^-$ ), sob essas condições

(b) Determine as concentrações dos íons  $\text{H}_3\text{O}^+$  e  $\text{OH}^-$  presentes na solução.

6) Em uma solução aquosa de hidróxido de potássio ( $\text{KOH}$ ; P.M.=56,1 g/mol), calcule:

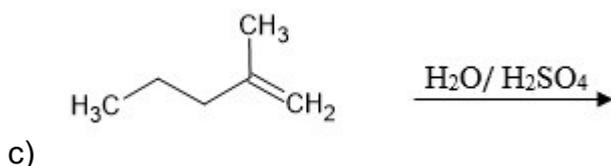
(a) A concentração em g/L e em mol/L de uma solução que contém 5,0 g de  $\text{KOH}$  dissolvidos em 250 mL de água.

(b) O volume que deve ser retirado da solução em (a) para preparar 100 mL de uma nova solução dessa mesma base numa concentração de 0,01 mol/L.

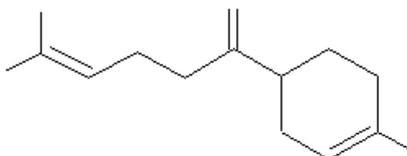
7) Descreva, através dos mecanismos, as sínteses a seguir e indique, quando for o caso, todas as possibilidades estereoquímicas dos produtos formados.

a) (Z)-hex-3-eno +  $\text{Br}_2 \rightarrow$

b) (S)-3-fenil-but-1-eno +  $\text{HI} \rightarrow$



8) A estrutura a seguir é do  $\beta$ -bisaboleno, um terpeno encontrado no óleo de Copaíba (*Copaifera langsdorffii*):



Com relação à estrutura do terpeno mostrado, responda as questões a seguir:

- Indique a fórmula molecular, o número de ligações sigma e pi e os tipos de orbitais envolvidos nas ligações entre os carbonos terciários e secundários;
- Mostre a fórmula molecular do produto formado quando o  $\beta$ -bisaboleno é tratado com  $3\text{Cl}_2/\text{CCl}_4$  e indique o número de centros de quiralidade e a quantidade de estereoisômeros possíveis para o produto da reação;
- Forneça a estrutura do produto principal da reação do  $\beta$ -bisaboleno com 3 mols de  $\text{HBr}$ /peróxido.