



PROCESSO DE SELEÇÃO PARA O PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA DA UFS – 2023.1

GABARITO

Questão 1) Quando a radiação eletromagnética incidente sobre a superfície metálica apresenta uma frequência mínima, elétrons são ejetados imediatamente da superfície. Considere que o elétron é ejetado da superfície de um dado metal com velocidade igual a 300 km s^{-1} e que a função de trabalho do metal é igual a 3 eV . Sabendo que a massa do elétron é de $9,109 \times 10^{-31} \text{ kg}$, a constante de Planck é igual a $6,626 \times 10^{-34} \text{ J s}$, a velocidade da luz corresponde a $3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$ e que 1 eV é igual a $1,602 \times 10^{-19} \text{ J}$, qual o valor da energia cinética com a qual o elétron deixa a superfície metálica e qual o valor mínimo de frequência que a radiação deve ter para promover a fotoejeção? Vale lembrar que o efeito fotoelétrico é explicado pela seguinte equação:

$$\frac{1}{2} m_e v^2 = h\nu - \Phi$$

Assinale a alternativa correta:

- a) $4,1 \times 10^{-26} \text{ J}$ e $7,3 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$
- b) $4,1 \times 10^{-20} \text{ J}$ e $4,5 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$
- c) $4,1 \times 10^{-20} \text{ J}$ e $7,3 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$
- d) $1,4 \times 10^{-28} \text{ J}$ e $8,0 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$
- e) $4,1 \times 10^{-20} \text{ J}$ e $8,0 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$

Questão 2) A energia potencial de interação entre as duas espécies químicas envolvidas em uma ligação iônica é diretamente proporcional ao produto das cargas do cátion e do ânion, porém inversamente proporcional à distância entre os íons ($d = r_{\text{cátion}} + r_{\text{ânion}}$). Considere os sólidos genéricos AG, BF e CD juntamente com as seguintes propriedades:

$$\text{raio de } A^+ > \text{raio de } B^+ = \text{raio de } C^{2+}$$

$$\text{raio de } G^- > \text{raio de } D^{2-} = \text{raio de } F^-$$

Assinale a alternativa correta:

- a) Espera-se que o ponto de fusão de AG seja maior que o de CD, pois A^- e G^+ apresentam os maiores raios iônicos.
- b) Dentre os três compostos dados, AG é aquele que apresenta a maior interação entre os íons.
- c) A interação eletrostática em BF é maior do que em CD.
- d) A ordem decrescente de energia potencial de interação entre os íons nos compostos é $CD > AG > BF$.
- e) CD corresponde ao sólido com o maior ponto de fusão dentre os fornecidos.



Questão 3) A ligação química consiste na junção de dois átomos, como resultado, o arranjo resultante apresenta energia menor do que a energia total dos átomos separados. O abaixamento energético ocorre em razão da transferência completa de elétrons entre os átomos, formando íons, ou pelo compartilhamento de elétrons, levando a interação entre os núcleos e os elétrons compartilhados. Neste sentido, considere as afirmações abaixo e assinale apenas a afirmação **INCORRETA**.

a) Os sólidos iônicos são quebradiços, pois quando uma camada do sólido é deslocada em relação à adjacente ocorre repulsão entre os íons de mesma carga.

b) No composto genérico AB_5 , o elemento central apresenta um par isolado de elétrons caso A e B apresentem as seguintes configurações eletrônicas: $[A] = 3s^23p^3$ e $[B] = 2s^22p^5$.

c) Para um composto genérico A_2B , em que A e B apresentam 1 e 6 elétrons de valência, respectivamente, a estrutura mais estável é aquela com arranjo atômico ABA.

d) A ligação entre dois átomos de oxigênio na molécula O_3 apresenta caráter intermediário entre uma ligação simples e uma ligação dupla OO em razão da ressonância eletrônica.

e) No composto CB_4 , em que C apresenta configuração eletrônica $1s^22s^22p^2$ e B configuração $1s^1$, todos os átomos têm carga formal igual a 0.

Questão 4) Considere cada afirmação abaixo que aborda a Teoria do Orbital Molecular (TOM) juntamente com a sua correspondente pontuação.

I- A configuração eletrônica no estado fundamental da molécula B_2 pode ser representada por $\sigma_{2s}^2\sigma_{2s}^{*2}\pi_{2p}^1\pi_{2p}^1$, sendo a ordem da ligação igual a 1.

II- A configuração eletrônica no estado fundamental correspondente à molécula O_2 é

$\sigma_{2s}^2\sigma_{2s}^{*2}\sigma_{2p}^2\pi_{2p}^4\pi_{2p}^{*1}\pi_{2p}^{*1}$, sendo a ordem da ligação igual a 2 e o orbital molecular σ_{2p}^* o LUMO.

III- A ligação no íon H_2^+ é mais forte que na molécula H_2 .

IV- A sobreposição dos orbitais atômicos p_x e p_x em uma molécula diatômica homonuclear produz 1 orbital molecular ligante e 1 antiligante, sendo o orbital molecular ligante de simetria g e o antiligante de simetria u.

A alternativa com os itens corretos é:

a) Apenas I

b) Apenas II e III

c) Apenas II e IV

d) Apenas I e II

e) Apenas I, III e IV



Questão 5) Suponha que estamos preparando culturas de bactérias que exigem um ambiente ácido e queremos preparar um tampão próximo de $\text{pH} = 4$. Preparamos, então, uma solução tampão que é $0,040 \text{ mol L}^{-1}$ em $\text{NaCH}_3\text{CO}_2(\text{aq})$ e $0,080 \text{ mol L}^{-1}$ $\text{CH}_3\text{COOH}(\text{aq})$, em 25°C . Qual é o pH da solução tampão? (Dado: $\text{pK}_a = 4,75$)

O ácido é CH_3COOH e a base conjugada é CH_3CO_2^- . O equilíbrio de interesse é



Encontre a concentração de equilíbrio dos íons H_3O^+ utilizando

$$K_a = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{CH}_3\text{CO}_2^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} \Rightarrow [\text{H}_3\text{O}^+] = (1,8 \times 10^{-5}) \times 0,080 / 0,040$$

$$\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+] \Rightarrow \text{pH} = 4,44$$

Questão 6) Que massa de óxido de ferro (III), Fe_2O_3 , presente no minério de ferro, é necessária para produzir $10,0 \text{ g}$ de ferro ao ser reduzida por monóxido de carbono ao metal ferro e ao gás dióxido de carbono em um alto-forno?

A equação química é



Converta massa em quantidade de produto utilizando sua massa molar:

$$\text{Quantidade de Fe (mol)} = 10,0 \text{ g} / 55,85 \text{ g mol}^{-1}$$

Calcule a quantidade de reagente utilizando a razão molar:

$$\text{Quantidade de Fe}_2\text{O}_3 \text{ (mol)} = (10,0 \text{ g} / 55,85 \text{ g mol}^{-1} \text{ Fe}) \times (1 \text{ mol Fe}_2\text{O}_3 / 2 \text{ mol Fe}) = 0,0895 \text{ mol Fe}_2\text{O}_3$$

Converta a quantidade de reagente em massa de reagente:

$$\text{Massa de Fe}_2\text{O}_3 = 0,0895 \text{ mol} \times 159,69 \text{ g mol}^{-1} = 14,3 \text{ g}$$



Questão 8) Considerando o composto hidratado, $\text{CuSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$, você deseja saber o número de moléculas de água para cada unidade CuSO_4 . No laboratório, você pesa 1,023 g de sólido. Após aquecê-lo de forma completa em um cadinho de porcelana, restam 0,654 g do sólido quase branco CuSO_4 anidro.

Encontre a massa de água:

$$(\text{massa do composto hidratado}) - (\text{massa do composto anidro}) = \\ (1,023 \text{ g}) - (0,654 \text{ g}) = 0,369 \text{ g.}$$

A seguir, converta as massas de CuSO_4 e H_2O para mol:

$$0,369 \text{ g H}_2\text{O} \times 1 \text{ mol H}_2\text{O} / 18,02 \text{ g H}_2\text{O} = 0,0205 \text{ mol H}_2\text{O}$$

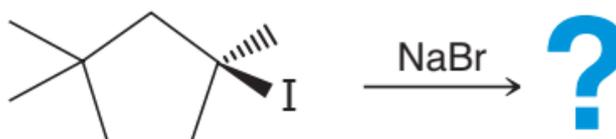
$$0,654 \text{ g CuSO}_4 \times 1 \text{ mol CuSO}_4 / 159,6 \text{ g CuSO}_4 = 0,00410 \text{ mol CuSO}_4$$

O valor de x é determinado pela razão molar:

$$0,0205 \text{ mol H}_2\text{O} / 0,00410 \text{ mol CuSO}_4 = 5,00 \text{ mol H}_2\text{O} / 1 \text{ mol CuSO}_4$$

A razão de água para CuSO_4 é de 5 para 1, portanto a fórmula do composto hidratado é **$\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$**

Questão 9) Considere a reação abaixo e responda:



a) Como é o nome do mecanismo que ela segue?

Resposta: Reação de Substituição Nucleofílica Unimolecular- $\text{S}_{\text{N}}1$

b) Baseado em qual informação dada na reação fez você decidir pelo mecanismo respondido no item a)?

Resposta: A estrutura do substrato, um haleto terciário.

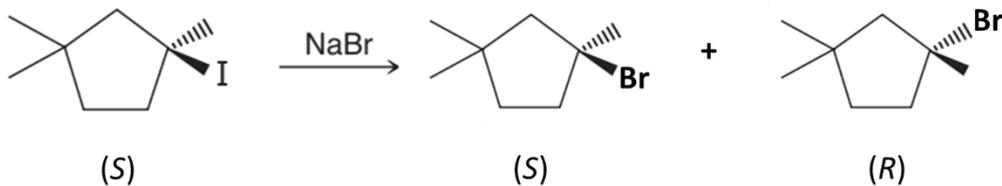
c) Dê a(s) estrutura(s) do(s) produto(s) formado(s) na reação.

Resposta:





d) Dê a configuração dos centros estereogênicos do substrato e do(s) produto(s) formado(s).



Questão 10) a) Por que o equilíbrio da interconversão cadeira-cadeira está deslocado para o confômero da direita?

Resposta: Porque como no anel estão presentes dois substituintes, o metil (CH_3 -) e o etil (CH_3CH_2 -), o confômero mais estável é aquele onde o substituinte maior está na equatorial. Por isso o equilíbrio se desloca para a direita, ou seja, a favor do confômero mais estável pois o grupo etil, que é maior do que o metil, está na equatorial.

b) Que nome se dá ao tipo de interação que está sendo representada em cada confômero?

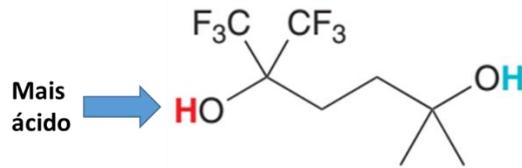
Resposta: Interação 1,3- diaxial.

c) Esta interação é favorável ou desfavorável para a estabilidade dos confômeros? Explique sua resposta com argumentos escritos.



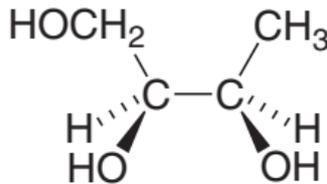
Resposta: Esta interação é desfavorável para a estabilidade dos confômeros, pois é uma interação de repulsão (impedimento estérico). No entanto, percebemos que no confômero da esquerda a interação é mais desfavorável do que no confômero da direita, pois a repulsão é maior quanto maior for o grupo que está na axial, elevando a energia do confômero, desestabilizando-o por consequência.

Questão 11) Qual dos hidrogênios do composto abaixo é mais ácido? Explique sua resposta com argumentos escritos.

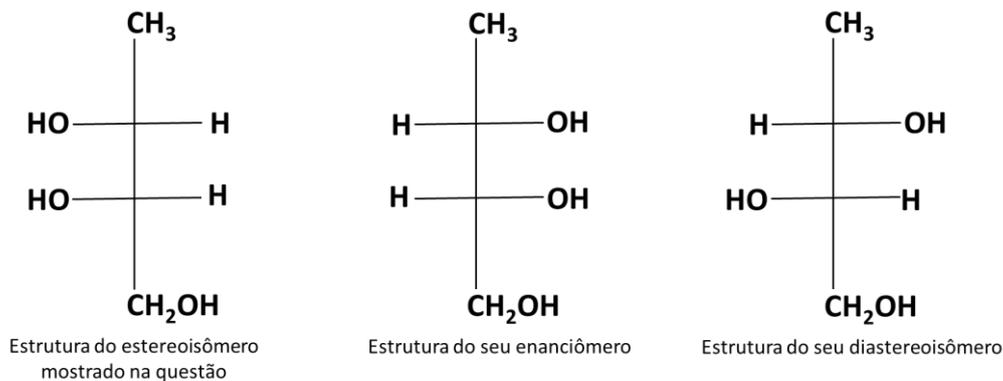


Resposta: O hidrogênio da hidroxila situado a esquerda na estrutura (indicado pela seta) é o mais ácido. Isso porque próximo a esta hidroxila há a presença de dois carbonos ligados a átomos de flúor, que são altamente eletronegativos. Os átomos de flúor atraem densidade eletrônica das ligações vizinhas em sua direção, polarizando mais a ligação H-O, deixando este hidrogênio com mais caráter positivo e, portanto, mais ácido.

Questão 12) Utilizando a projeção de Fischer, represente a estrutura do estereoisômero mostrado abaixo, de um enantiômero e um diastereoisômero dele.



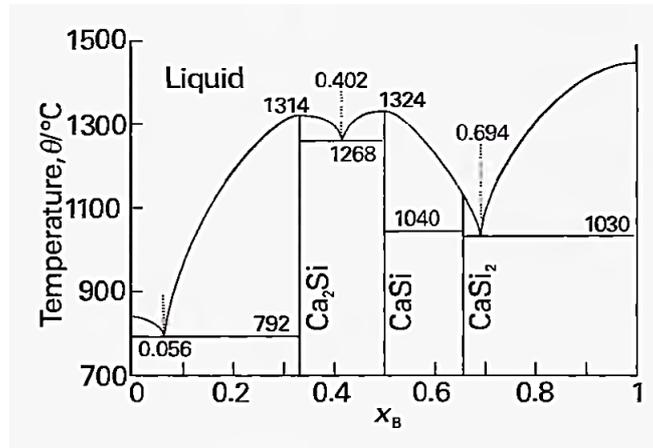
Resposta:



Questão 13) O diagrama de fases temperatura-composição do sistema binário Ca/Si é mostrado na figura. Identifique os eutéticos, compostos com fusão congruente e incongruente.

Assinale a alternativa que contém as respostas corretas para as seguintes perguntas:

- i) Se um líquido fundido contendo 20% de átomos de Si inicialmente a 1500 °C é resfriado até 900 °C, as fases presentes serão _____; ii) Se um líquido fundido contendo 40% de átomos de Si inicialmente a 1500 °C é resfriado até 1100 °C, as fases presentes serão _____; iii) os eutéticos de temperaturas de fusão mais altas são: _____



- a) i) Ca sólido e Ca₂Si líquido ii) Ca₂Si sólido e CaSi sólido iii) eutéticos: $x_B = 0,056$ e $T = 792$ °C e $x_B = 0,42$ e $T = 1268$ °C
- b) i) Ca sólido e Ca₂Si sólido ii) líquido e Ca₂Si sólido iii) eutéticos: $x_B = 0,056$ e $T = 792$ °C e $x_B = 0,694$ e $T = 1030$ °C
- c) i) Ca₂Si sólido e líquido com 8 % Si ii) Ca₂Si sólido e CaSi sólido iii) eutéticos: $x_B = 0,42$ e $T = 1268$ °C; $x_B = 0,694$ e $T = 1030$ °C
- d) i) Ca₂Si líquido e fase sólida com 8 % Si ii) líquido e Ca₂Si sólido iii) eutéticos: $x_B = 0,42$ e $T = 1268$ °C; $x_B = 0,694$ e $T = 1030$ °C

Questão 14) Considere o efeito fotoelétrico. A função de trabalho de Na puro é 2,75 eV, onde $1 \text{ eV} = 1,602 \times 10^{-19} \text{ J}$. Assinale a alternativa que contém as respostas corretas para: i) calcule a energia cinética máxima de um fotoelétron emitido a partir de Na puro exposto a radiação UV de $\lambda = 200 \text{ nm}$; ii) calcule o comprimento de onda mais longo que poderá causar o efeito fotoelétrico em Na puro são:

- a) i) 3,45 eV; ii) 451,2 nm
- b) i) 617,66 eV, ii) 451,2 nm
- c) i) 3,45 eV; ii) 1,162 nm
- d) i) 617,66 eV, ii) 1,162 nm

Questão 15) Para uma reação com energia de ativação $E_a = 4,79 \text{ kcal mol}^{-1}$, calcule qual a temperatura que faz com que a constante de velocidade aumente por um fator de 1,5 em relação ao seu valor na temperatura ambiente e assinale a alternativa que contém a resposta correta. Dados: $1 \text{ cal} = 4,184 \text{ J}$; $R = 8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$; $k = A \cdot e^{-E_a/RT}$



a) $T_2 = 313,73 \text{ K}$

b) $T_2 = 402,7 \text{ K}$

c) $T_2 = 6 \text{ K}$

d) $T_2 = 3137,3 \text{ K}$

Questão 16)

Considere as colocações a seguir, nas quais algumas informações foram omitidas:

i) _____ é a função termodinâmica que permite encontrar as taxas de variação da entalpia e da entropia com respeito a temperatura à pressão constante;

ii) _____ é a função termodinâmica que permite verificar se a substância i na fase α está em equilíbrio com a substância i na fase β ;

iii) para um sistema fechado capaz de realizar apenas trabalho P-V, mantido a _____ constantes, a energia de Gibbs atinge o _____ no equilíbrio material; iv) a constante de equilíbrio de uma reação entre gases ideais irá aumentar ou diminuir com o aumento da temperatura dependendo do sinal de _____.

Assinale a alternativa que contém as informações corretas que foram omitidas.

a) i) C_V ; ii) ΔH ; iii) p e V máximo; iv) ΔG

b) i) C_P ; ii) ΔG ; iii) p e T máximo; iv) ΔH

c) i) C_V ; ii) $\mu^{i\alpha} \mu^{i\beta}$; iii) p e V mínimo; iv) Δn

d) i) ΔU ; ii) ΔG ; iii) p e T máximo; iv) Δn

e) i) C_P ; ii) $\mu^{i\alpha} \mu^{i\beta}$; iii) p e T mínimo; iv) ΔH