



GABARITO DO PROCESSO DE SELEÇÃO PARA O PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA DA UFS – 2015.2

Questão 1)

Cl-Cl sobreposição frontal entre o orbital 3p (no mesmo eixo) de cada cloro.



HCl sobreposição frontal entre o orbital 1s do hidrogênio e 3p do cloro.



Questão 2)

(a) O NaCl está mais fortemente ligado do que KCl, pois o íon Na^+ possui raio iônico menor do que o íon K^+ .

(b) $\text{I}^- \Rightarrow [\text{Kr}] 5s^2 5p^6$ nenhum elétron desemparelhado

$\text{Cu} \Rightarrow [\text{Ar}] 3d^{10} 4s^1$ 1 elétron desemparelhado

$\text{Fe}^{3+} \Rightarrow [\text{Ar}] 3d^5$ 5 elétrons desemparelhados

Questão 3)

Pelos valores de kps fornecidos, observa-se que o íon brometo deverá precipitar primeiro.

Logo, iremos determinar a concentração de Ag^+ necessária para iniciar a precipitação do segundo íon.

$k_{\text{psAgCl}} = [\text{Ag}^+][\text{Cl}^-]$; $[\text{Ag}^+] = 1,8 \times 10^{-10} / 0,001$; $[\text{Ag}^+] = 1,8 \times 10^{-7} \text{ mol L}^{-1}$. Esta será a concentração limitante do primeiro íon.

Calculamos então qual a concentração de brometo neste ponto:

$k_{\text{psAgBr}} = [\text{Ag}^+][\text{Br}^-]$; $[\text{Br}^-] = 3,3 \times 10^{-13} / 1,8 \times 10^{-7}$; $[\text{Br}^-] = 1,8 \times 10^{-6} \text{ mol L}^{-1}$.

Considerando que inicialmente haviam $1,0 \times 10^{-3} \text{ mol L}^{-1}$ do sal, que equivale ao mesmo do íon, então tínhamos $1,0 \times 10^{-4} \text{ mol}$ de Br^- em 100 mL de solução, o que equivale a $7,99 \times 10^{-3} \text{ g}$ de Br^- por 100 mL de solução. Sabendo que restaram em solução $1,8 \times 10^{-6} \text{ mol L}^{-1}$, aplicando a mesma interpretação, isto equivale a $1,4382 \times 10^{-5} \text{ g}$ de Br^- , logo, restam 0,18 % (m/v).

Questão 4)

Na primeira mistura $2,5 \times 10^{-4}$ mol de CH_3COOH foram misturados com $1,25 \times 10^{-4}$ mol de NaOH , resultando no consumo total da base e na produção de $1,25 \times 10^{-4}$ mol do íon acetato, e restando quantidade equivalente de CH_3COOH .

Considerando a equação para o equilíbrio químico do CH_3COOH , teremos que:

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = K_a [\text{CH}_3\text{COOH}] / [\text{Ac}^-]; [\text{H}_3\text{O}^+] = 1,8 \times 10^{-5} * 0,004 / 0,004; \text{logo,}$$

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = 1,8 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}; \text{pH} = \text{p}K_a; \text{pH} = 4,74.$$

Quando a esta mistura é adicionado KOH ($2,5 \times 10^{-5}$ mol) este consumirá na mesma proporção o CH_3COOH , produzindo na mesma proporção o íon acetato. Assim temos:

$$\text{CH}_3\text{COOH} = 1,25 \times 10^{-4} \text{ mol} - 2,5 \times 10^{-5} \text{ mol} = 1,0 \times 10^{-4} \text{ mol}$$

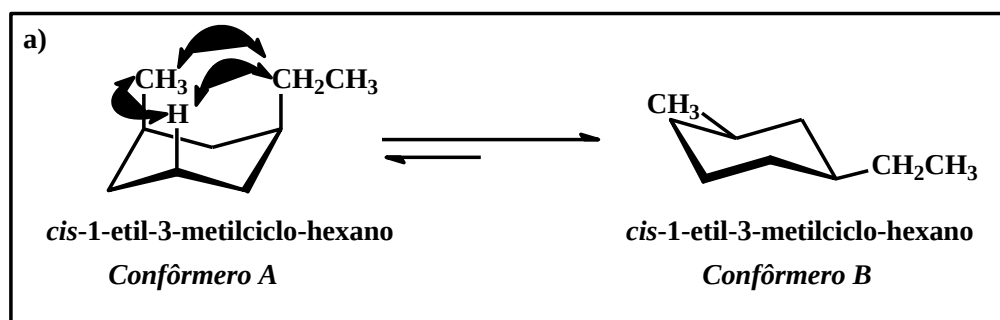
$$\text{Ac}^- = 1,25 \times 10^{-4} \text{ mol} + 2,5 \times 10^{-5} \text{ mol} = 1,5 \times 10^{-4} \text{ mol}$$

Considerando o volume final da solução (36,25 mL) e as concentrações finais das espécies, o pH pode ser determinado conforme segue:

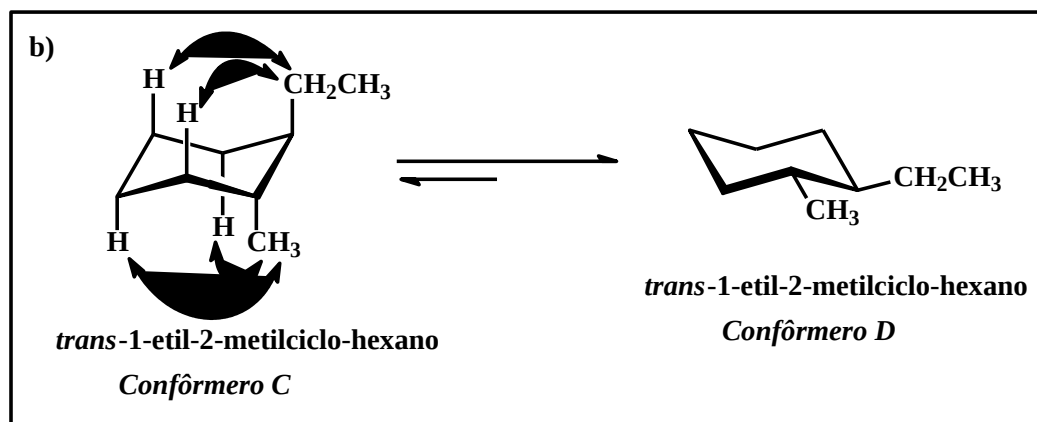
$$[\text{H}_3\text{O}^+] = K_a [\text{CH}_3\text{COOH}] / [\text{Ac}^-]; [\text{H}_3\text{O}^+] = 1,8 \times 10^{-5} * 0,0027 / 0,0041; \text{logo,}$$

$$[\text{H}_3\text{O}^+] = 1,18 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}; \text{pH} = 4,92.$$

Questão 5)



A figura acima mostra os dois confômeros do **cis-1-etil-3-metilciclo-hexano**. O confômero mais estável é o *Confômero B*, pois nele temos os dois grupos, o etila e o metila, na posição equatorial. Desta forma, o *Confômero B* não apresenta as interações 1,3-diaxial (interações repulsivas de van der Waals, mostradas através das setas duplas curvas) presentes no *Confômero A*, as quais são responsáveis pela desestabilização deste confômero.



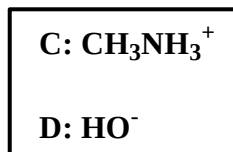
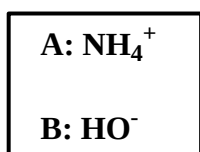
A figura acima mostra os dois confôrmeros do ***trans*-1-etil-2-metilciclo-hexano**. O confôrmero mais estável é o *Confômero D*, pois nele temos os dois grupos, o etila e o metila, na posição equatorial. Desta forma, o *Confômero D* não apresenta as interações 1,3-diaxial (interações repulsivas de van der Waals, mostradas através das setas duplas curvas) presentes no *Confômero C*, as quais são responsáveis pela desestabilização deste confôrmero.

Questão 6)

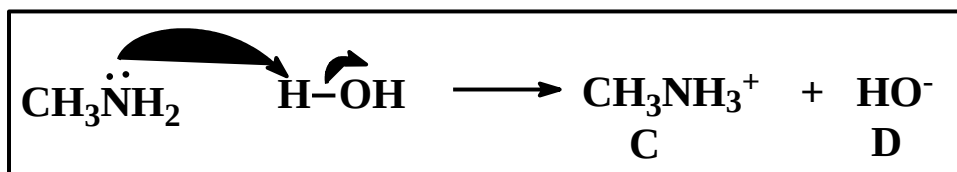
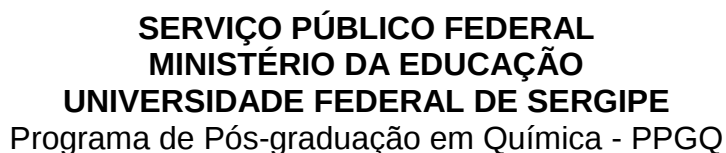
a) A metilamina é a base mais forte.

b) Como a metilamina produz o ácido conjugado mais fraco (pK_a maior) do que a amônia, a metilamina é a base mais forte. Isso se deve ao fato da maior disponibilidade dos elétrons livres do nitrogênio na estrutura da metilamina para capturar o hidrogênio da água como H^+ . Isso ocorre porque o grupo metila, ligado diretamente ao nitrogênio, tem o efeito doador de elétrons, aumentando esta disponibilidade eletrônica. Consequentemente, o ácido conjugado formado, o $CH_3NH_3^+$, é o ácido mais fraco porque o efeito doador de elétrons do grupo metila ajuda a estabilizar a carga positiva gerada no nitrogênio, diminuindo, assim, sua tendência em liberar o H^+ .

c)



d)



The phase diagram for the Bi-Te system shows the following key features:

- Y-axis:** Temperature T in $^{\circ}\text{C}$, ranging from 0 to 600.
- X-axis:** Composition in $\% \text{ Bi}$, ranging from 0 to 100.
- Liquidus Curve:** A curve starting at 400°C (0% Bi), peaking at 600°C (50% Bi), and reaching a eutectic at 200°C (90% Bi).
- Key Points:**
 - 400°C : Invariant point at 0% Bi.
 - 600°C : Maximum solubility of Bi in Te at 50% Bi.
 - 200°C : Eutectic point at 90% Bi.
 - 300°C : A point on the Bi-rich liquidus curve.
- Phase Regions:**
 - L:** Liquid phase.
 - L+Te:** Two-phase region of liquid and tellurium.
 - L+BiTe:** Two-phase region of liquid and bismutelluride.
 - Te+BiTe:** Two-phase region of tellurium and bismutelluride.
 - BiTe:** Single-phase region of bismutelluride.
 - L+Bi:** Two-phase region of liquid and bismuth.
 - Bi+BiTe:** Two-phase region of bismuth and bismutelluride.

Considerando:

$$pV = nRT$$

A um mesmo valor de nR temos:

$$\frac{p_1 V_1}{0^\circ\text{N} + T} = \frac{p_2 V_2}{100^\circ\text{N} + T}$$

$$\frac{p_1 V_1}{0^\circ\text{N} + T} = \frac{p_2 V_2}{100^\circ\text{N} + T}$$

$$T = 233\text{ K}$$

Esta temperatura corresponde a 0 °N, portanto o zero absoluto corresponde a -233 K.