

# **GABARITO QUÍMICA**

#### Questão 1

Você trabalha em um laboratório que investiga as propriedades de nanomateriais semicondutores. Uma de suas pesquisas requer que você sintetize nanocristais de CdSe ao reagir CdO com Se em solução, em temperaturas elevadas. A solução de Se é preparada dissolvendo  $150\,\mathrm{mg}$  do metal selênio em  $25\,\mathrm{mL}$  de um solvente, o 1-octadeceno. Em outro frasco,  $64\,\mathrm{mg}$  de CdO são dissolvidos em  $3\,\mathrm{mL}$  de ácido oleico e  $50\,\mathrm{mL}$  de 1-octadeceno, em  $225\,^{\circ}\mathrm{C}$ .

- a. (Valor: 0,5) **Determine** as configurações eletrônicas do Cd e do Se.
- b. (Valor: 0,5) Determine o grupo e o período do Cd e do Se na Tabela Periódica.
- c. (Valor: 0,5) **Explique** qual elemento tem maior probabilidade de formar um ânion no composto iônico CdSe.
- d. (Valor: 0,5) Calcule volume de solução de selênio precisa ser adicionado à solução de CdO.

#### Gabarito

a. As configurações eletrônicas:

Cd: [Kr] 
$$4d^{10} 5s^2$$
  
Se: [Ar]  $3d^{10} 4s^2 4p^4$ 

- b. O Cd está no Grupo 12, Período 5. O Se está no Grupo 16, Período 4.
- ${\bf c.}$  O selênio possui maior energia de ionização e afinidade eletrônica. Assim, o Se deve formar o ânion Se $^{2-}$ no composto iônico.
- d. Cálculo da quantidade de CdO.

$$n_{\rm Cd} = \frac{m_{\rm CdO}}{M_{\rm CdO}} = \frac{64\,{\rm mg}}{128\,\frac{\rm mg}{\rm mmol}} = 0.5\,{\rm mmol}$$

Cálculo da concentração de selênio.

$$c_{\rm Se} = \frac{n_{\rm Se,total}}{V_{\rm Se,total}} = \frac{\left(\frac{150\,\mathrm{mg}}{79\,\frac{\mathrm{mg}}{\mathrm{mmol}}}\right)}{25\,\mathrm{mL}} = 0.08\,\mathrm{mmol\,mL^{-1}}$$

Como o Se e o CdO reagem na razão 1:1, são necessários  $0.5\,\mathrm{mmol}$  de Se para reagir com todo o CdO. Cálculo do volume da solução de selênio.

$$V_{\mathrm{Se}} = \frac{n_{\mathrm{Se,reage}}}{V_{\mathrm{Se,reage}}} = \frac{0.5\,\mathrm{mmol}}{0.08\,\mathrm{mmol\,mL^{-1}}} = \boxed{6.25\,\mathrm{mL}}$$



### Questão 2

Nos mamíferos, o metabolismo gera subprodutos nocivos, como o peróxido de hidrogênio, os íons superóxido e radicais contendo oxigênio, designados pelo termo genérico espécies reativas de oxigênio. A glutationa (GSH) é um tripeptídeo importante, pois atua como potente antioxidante. O grupo tiol atua como alvo dos agentes oxidantes, perdendo um átomo de hidrogênio e formando uma ligação dissulfeto com outra molécula de GSH. Você está investigando maneiras de proteção contra o estresse oxidativo e precisa saber mais sobre a química desse composto essencial.

HOOC 
$$NH_2$$
  $NH_2$   $NH$ 

Os valores de p $K_a$  da glutationa são p $K_{a1}=2.12$  e p $K_{a2}=3.59$  para a desprotonação sucessiva dos dois grupos COOH, p $K_{a3}=8.75$  para o grupo NH<sub>2</sub> e p $K_{a4}=9.65$  para o grupo SH.

a. (Valor: 0,5) Identifique as funções orgânicas presentes na glutationa.

b. (Valor: 0,5) Identifique os produtos de hidrólise completa da glutationa.

c. (Valor: 0,5) **Determine** o número de estereoisômeros da glutationa.

d. (Valor: 0,5) Determine a forma predominante de GSH no pH fisiológico, 7,4.

#### **Gabarito**

a. Ácido carboxílico, amina, amida e tiol.

 ${f b.}$  A glutationa sofre hidrólise dos gurpos amida, que é convertido em um grupo ácido carboxílico e um grupo amina.

 ${\bf c.}\,$  A glutationa possui dois carbonos quirais e, portanto,  $2^2=4$  estereoisômeros.

HOOC 
$$\stackrel{\star}{\underset{NH_2}{\bigvee}}$$
  $\stackrel{\bullet}{\underset{NH_2}{\bigvee}}$   $\stackrel{\bullet}{\underset{NH_2}{\bigvee}}$   $\stackrel{\bullet}{\underset{NH_2}{\bigvee}}$  COOH

**d.** Em pH = 7,4, os grupos com p $K_a < 7,4$  estarão desprotonados e os grupos com p $K_a > 7,4$  estarão protonados.



#### Questão 3

Uma planta produz etanol pela hidratação do eteno em altas temperaturas.

$$C_2H_4(g) + H_2O(g) \rightleftharpoons C_2H_5OH(g)$$
  $K_{300 \circ C} = 26$ 

Um reator é carregado com 60 bar de eteno e 40 bar de água em  $300\,^{\circ}$ C. A mistura atinge o equilíbrio no reator. A mistura no equilíbrio é resfriada a  $25\,^{\circ}$ C e transferida para um tambor, permitindo que todo o excesso de eteno escape.

- a. (Valor: 0,5) **Determine** a entalpia de síntese do etanol.
- b. (Valor: 0,5) **Determine** a composição do equilíbrio no reator a 300 °C.
- c. (Valor: 0,2) Explique qual seria o efeito da adição de etanol à composição do equilíbrio a 300 °C.
- d. (Valor: 0,3) Compare a constante de equilíbrio de síntese do etanol a 300 °C e a 25 °C.
- e. (Valor: 0,5) **Determine** a pressão de vapor no tambor a 25 °C.

#### Dados

- Entalpia de formação do eteno,  $\Delta H_{\rm f}^{\circ}({\rm C_2H_4}) = 53\,{\rm kJ\,mol}^{-1}$
- Entalpia de formação da água,  $\Delta H_{\rm f}^{\circ}({\rm H_2O}) = -242\,{\rm kJ\,mol}^{-1}$
- Entalpia de formação do etanol,  $\Delta H_{\rm f}^{\circ}({\rm C_2H_5OH}) = -253\,{\rm kJ\,mol^{-1}}$
- Pressão de vapor da água,  $P^*(H_2O) = 24 \text{ Torr}$
- Pressão de vapor do etanol,  $P^*(C_2H_5OH) = 60 \text{ Torr}$

## Questão 4

Materiais híbridos orgânicos e inorgânicos são estudados para aplicação em dispositivos ópticos de armazenamento. Um composto potencialmente útil é o dihidrogenofosfato de N-metil-2,4,6-trifenilpiridínio,  $C_5H_{12}N$ . O cátion possui uma estrutura análoga à do benzeno, com um nitrogênio heteroátomo.

- a. (Valor: 0,5) Apresente a estrutura molecular para o ânion dihidrogenofosfato.
- b. (Valor: 0,5) **Descreva** a geometria molecular do ânion dihidrogenofosfato.
- c. (Valor: 0,5) Compare os ângulos de ligação O-P-O e HO-P-OH.
- d. (Valor: 0,3) Apresente a estrutura molecular para o cátion N-metil-2,4,6-trifenilpiridínio.
- e. (Valor: 0,2) **Indique** os orbitais que participam do sistema aromático.

#### Questão 5

Em uma estação de tratamento de água deseja-se medir a concentração de íons ferro(II). O ferro(II) reage com 1,10-fenantrolina, phen, para formar o complexo vermelho ferroína,  $Fe(phen)_3^{2+}$ , cuja concentração pode ser determinada por espectrofotometria. Entretanto, em solução ácida o complexo se decompões conforma a reação

$$Fe(phen)_3^{2+}(aq) + 3 H_3 O^+(aq) \longrightarrow Fe^{2+}(aq) + 3 Hphen^+(aq) + 3 H_2 O(l)$$

Os experimentos a seguir foram realizados em 40 °C.

Exp.	$[\mathrm{Fe}(\mathrm{phen})_3^{2+}]/\mathrm{M}$	$[{ m H_2O}]/{ m M}$	$v_0/\mathrm{mMs^{-1}}$
1 2	$7,50 \times 10^{-3} \\ 7,50 \times 10^{-3}$	$0.50 \\ 0.05$	$9.0 \times 10^{-6} \\ 9.0 \times 10^{-6}$
3	$3,75 \times 10^{-2}$	0,05	$4.5\times10^{-5}$

A constante de velocidade desse processo em  $70\,^{\circ}\text{C}$  é  $8.5 \times 10^{-2}\,\text{M}\,\text{s}^{-1}$ .

- a. (Valor: 0,8) **Determine** a constante de velocidade da reação em 40 °C.
- b. (Valor: 0,8) **Determine** a energia de ativação da reação.
- c. (Valor: 0,4) **Determine** o tempo de meia-vida da reação em 25 °C.