

## QUÍMICA

### Dados

- Constante de Avogadro,  $N_A = 6,02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
- Carga elementar,  $e = 1,6 \times 10^{-19} \text{ C}$
- Constante de Planck,  $h = 6,6 \times 10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-1}$
- Constante de autoionização da água,  $K_w = 1 \times 10^{-14}$
- Constante de Faraday,  $F = 96\,500 \text{ C mol}^{-1}$
- Constante dos gases,  $R = 8,31 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
- Constante de Rydberg,  $R_\infty = 1,1 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$
- Velocidade da luz no vácuo,  $c = 3 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$

### Definições

- Composição do ar atmosférico: 79%  $\text{N}_2$  e 21%  $\text{O}_2$

### Aproximações Numéricas

- $\sqrt{2} = 1,4$
- $\sqrt{3} = 1,7$
- $\sqrt{5} = 2,2$
- $\log 2 = 0,3$
- $\log 3 = 0,5$
- $\ln 10 = 2,3$

### Tabela Periódica

1 <b>H</b> 1,01	6 <b>C</b> 12,01	7 <b>N</b> 14,01	8 <b>O</b> 16,00	11 <b>Na</b> 22,99	12 <b>Mg</b> 24,31	16 <b>S</b> 32,06	17 <b>Cl</b> 35,45	26 <b>Fe</b> 55,84	34 <b>Se</b> 78,97	48 <b>Cd</b> 112,41
-----------------------	------------------------	------------------------	------------------------	--------------------------	--------------------------	-------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	---------------------------

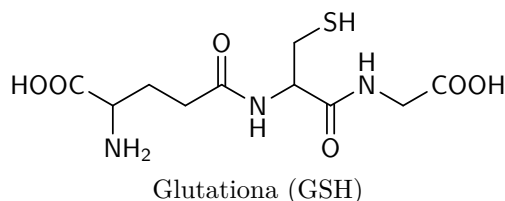
### Questão 1

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

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

## 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 glutathiona (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.

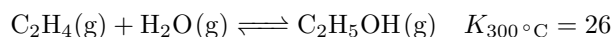


Os valores de  $pK_a$  da glutathiona são  $pK_{a1} = 2,12$  e  $pK_{a2} = 3,59$  para a desprotonação sucessiva dos dois grupos  $COOH$ ,  $pK_{a3} = 8,75$  para o grupo  $NH_2$  e  $pK_{a4} = 9,65$  para o grupo  $SH$ .

- (Valor: 0,5) **Identifique** as funções orgânicas presentes na glutathiona.
- (Valor: 0,5) **Identifique** os produtos de hidrólise completa da glutathiona.
- (Valor: 0,5) **Determine** o número de estereoisômeros da glutathiona.
- (Valor: 0,5) **Determine** a forma predominante de GSH no pH fisiológico, 7,4.

## Questão 3

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



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.

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

### Dados

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

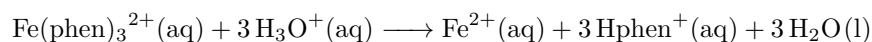
#### Questão 4

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. O cátion possui uma estrutura análoga à do benzeno, com um nitrogênio heteroátomo.

- (Valor: 0,5) **Apresente** a estrutura molecular para o ânion dihidrogenofosfato.
- (Valor: 0,5) **Descreva** a geometria molecular do ânion dihidrogenofosfato.
- (Valor: 0,5) **Compare** os ângulos de ligação O–P–O e HO–P–OH.
- (Valor: 0,3) **Apresente** a estrutura molecular para o cátion *N*-metil-2,4,6-trifenilpiridínio.
- (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,  $\text{Fe(phen)}_3^{2+}$ , cuja concentração pode ser determinada por espectrofotometria. Entretanto, em solução ácida o complexo se decompõe conforme a reação



Os experimentos a seguir foram realizados em 40 °C.

Exp.	$[\text{Fe(phen)}_3^{2+}]/\text{M}$	$[\text{H}_2\text{O}]/\text{M}$	$v_0/\text{mM s}^{-1}$
1	$7,50 \times 10^{-3}$	0,50	$9,0 \times 10^{-6}$
2	$7,50 \times 10^{-3}$	0,05	$9,0 \times 10^{-6}$
3	$3,75 \times 10^{-2}$	0,05	$4,5 \times 10^{-5}$

A constante de velocidade desse processo em 70 °C é  $8,5 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ .

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