



# CICLO DIAGNÓSTICO - QUÍMICA

TURMA IME-ITA

2022



## DADOS

### Constantes

- Constante dos Gases  $R = 8,3 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

### Elementos

Elemento Químico	Número Atômico	Massa Molar ( $\text{g mol}^{-1}$ )	Elemento Químico	Número Atômico	Massa Molar ( $\text{g mol}^{-1}$ )
H	1	1,01	Ar	18	39,95
He	2	4,00	K	19	39,10
C	6	12,01	Ca	20	40,08
N	7	14,01	Cr	24	52,00
O	8	16,00	Fe	26	55,84
F	9	19,00	Cu	29	63,55
Ne	10	20,18	Zn	30	65,38
Na	11	22,99	Br	35	79,90
Mg	12	24,31	Nb	41	92,91
S	16	32,06	Sb	51	121,76
Cl	17	35,45	I	53	126,90

## 1ª QUESTÃO

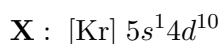
O nióbio-92 e o bromo-80 são, respectivamente, isóbaro e isótono de um nuclídeo **X**.

- Determine** o período e o grupo de **X** na tabela periódica.
- Determine** configuração eletrônica de **X** em seu estado fundamental.
- Determine** os números quânticos do elétron mais energético de **X** em seu estado fundamental.

### Gabarito

- Período 5, grupo 11.
- X** :  $[\text{Kr}]5s^14d^{10}$
- $n = 4, l = 2, m_l = +2, m_s = 1/2$

- O número de massa de **X** é  $A = 92$ . O número de nêutrons de **X** é o mesmo que o do bromo-80,  $n = 80 - 35 = 45$ . Assim, o número atômico de **X** é  $Z = 47$  (Ag). - A distribuição eletrônica de **X** é:



- O elétron mais energético de **X** está no orbital  $4d^{10}$ , cujos números quânticos são:

$$n = 4, l = 2, m_l = +2, m_s = 1/2$$

Adotando a convenção de que o primeiro elétron em um orbital possui número quântico de *spin*  $m_s = -1/2$ .

## 2ª QUESTÃO

Um hidrocarboneto acíclico **X** possui densidade relativa ao ar menor que 4. Uma mistura de hexano contendo 10,15 % em massa de **X** foi queimada com oxigênio em um recipiente selado. Após o resfriamento dos produtos verificou-se que havia 9,54 g de água e 5 L de uma mistura composta de 20 % CO e 80 % de CO<sub>2</sub>, em volume, a 300 K e 234,4 kPa.

- Determine** a fórmula empírica do hidrocarboneto desconhecido.
- Apresente** todas as fórmulas estruturais possíveis para **X**.
- Determine** o volume de oxigênio utilizado no experimento.

### Gabarito

- C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>
- 6 estruturas possíveis
- 7,31 L

Todo oxigênio no experimento é convertido em CO, CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O. Assim,

$$2n_{O_2} = n_{CO} + 2n_{CO_2} + n_{H_2O} \quad (I)$$

O número de mols de água é simplesmente

$$n_{H_2O} = \frac{m_{H_2O}}{M_{H_2O}} = \frac{9,54 \text{ g}}{18 \text{ g/mol}} = 0,53 \text{ mol}$$

O número de mols de gases pode ser obtido como  $n_g = PV/RT$ , logo:

$$\begin{aligned} n_{CO_2} &= \frac{p_{CO_2} V}{RT} = \frac{0,8 \cdot 5 \text{ L}}{0,082 \text{ L atm/mol K} \cdot 300 \text{ K}} = 0,376 \text{ mol} \\ n_{CO} &= \frac{p_{CO} V}{RT} = \frac{0,2 \cdot 5 \text{ L}}{0,082 \text{ L atm/mol K} \cdot 300 \text{ K}} = 0,094 \text{ mol} \end{aligned}$$

Substituindo na Equação I, obtemos:

$$n_{O_2} = 0,688 \text{ mol}$$

Finalmente

$$V_{O_2} = \frac{n_{O_2} RT}{P} = 7,31 \text{ L}$$

A massa de **X** pode ser calculada por conservação. Seja  $m$  a massa da mistura combustível, isso é,  
 $m = m_{\text{X}} + m_{\text{hexano}}$ :

$$m + m_{\text{O}_2} = m_{\text{H}_2\text{O}} + m_{\text{CO}} + m_{\text{CO}_2}$$

Logo:

$$\begin{aligned} m + n_{\text{O}_2} M_{\text{O}_2} &= n_{\text{H}_2\text{O}} M_{\text{H}_2\text{O}} + n_{\text{H}_2\text{O}} M_{\text{CO}} \\ + n_{\text{H}_2\text{O}} M_{\text{CO}_2} \end{aligned} \quad \text{e} \quad m_{\text{X}} = 6,7 \text{ g}$$

Como **X** representa 10, 15% da massa da mistura combustível:

$$m_{\text{X}} = 0,68 \text{ g} \quad \text{e} \quad m_{\text{hexano}} = 6,02 \text{ g}$$

O número de mols de hexano ( $\text{C}_6\text{H}_{14}$ ) é:

$$n_{\text{hexano}} = \frac{m_{\text{hexano}}}{M_{\text{hexano}}} = 0,07 \text{ mol}$$

Essa quantidade leva à formação de  $6 \cdot 0,07 \text{ mol} = 0,42 \text{ mol}$  de carbono e  $14 \cdot 0,07 \text{ mol} = 0,98 \text{ mol}$  de hidrogênio. Como foram formados  $n_{\text{CO}_2} + n_{\text{CO}} = 0,47 \text{ mol}$  de carbono e  $2n_{\text{H}_2\text{O}} = 1,06 \text{ mol}$  de hidrogênio, conclui-se que a combustão de **X** leva à formação de 0,05 mol de carbono e 0,08 mol de hidrogênio, o que corresponde à fórmula mínima:

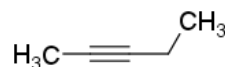
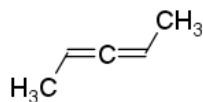
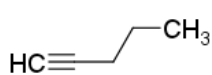
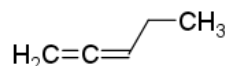
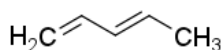
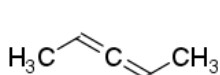
$$\boxed{\text{X} = \text{C}_5\text{H}_8}$$

Como a densidade de **X** é menor que quatro vezes a densidade do ar, a massa molar de **X** não pode ser mais de quatro vezes a massa molar média do ar, assim,

$$M_{\text{X}} < 4 \cdot 29 \text{ g/mol} = 116 \text{ g/mol}$$

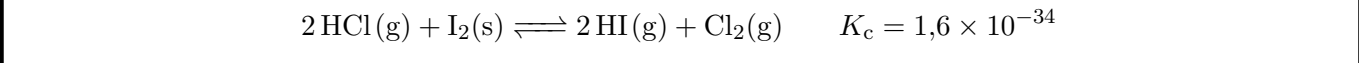
Concluimos, portanto, que a fórmula molecular de **X** é  $\text{C}_5\text{H}_8$ .

Existem 6 estruturas possíveis com essa fórmula molecular:



### 3ª QUESTÃO

Quando  $\text{HCl(g)}$  e  $\text{I}_2\text{(s)}$  reagem o equilíbrio a seguir é estabelecido.



Em um primeiro experimento, 4 L de  $\text{HCl(g)}$  a 1 atm e 273 K e 26,0 g de  $\text{I}_2(\text{s})$  são adicionados a um recipiente de 12 L com pistão e aquecidos a 25 °C. Em um segundo experimento, 6 L uma mistura equimolar de  $\text{HI(g)}$  e  $\text{Cl}_2(\text{g})$  a 1 atm e 273 K são adicionados ao mesmo recipiente e aquecidos a 25 °C.

- Determine** as quantidades de todas as espécies no equilíbrio no primeiro experimento.
- Determine** as quantidades de todas as espécies no equilíbrio no segundo experimento.
- Explique** o efeito da redução do volume na composição do equilíbrio.
- Explique** o valor da constante de equilíbrio com base na reatividade das substâncias.

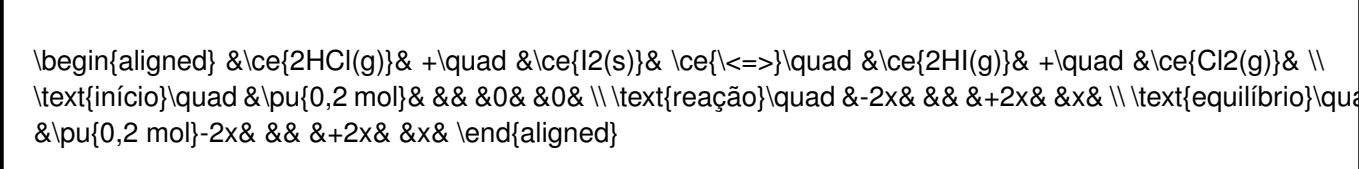
**Gabarito**

- a)  $n_{\text{HCl}} = 0,2 \text{ mol}$ ,  $n_{\text{HI}} = 5,4 \times 10^{-12} \text{ mol}$ ,  $n_{\text{HCl}} = 2,7 \times 10^{-12} \text{ mol}$ ,  $n_{\text{I}_2} = 0,1 \text{ mol}$
- b)  $n_{\text{HCl}} = 0,15 \text{ mol}$      $n_{\text{HI}} = 2,4 \times 10^{-17} \text{ mol}$      $n_{\text{HCl}} = 0,075 \text{ mol}$      $n_{\text{I}_2} = 0,075 \text{ mol}$
- c) A redução do volume desloca o equilíbrio no sentido da formação de HCl e  $\text{I}_2$ , diminuindo o número de mols de gás.
- d) Por ser mais eletronegativo que o iodo, o cloro possui maior tendência de estar na forma reduzida.

{=html} <!-- --> - O número de mols de ácido clorídrico inicial no primeiro experimento é:

$$n = \frac{4 \text{ L}}{22,4 \text{ L/mol}} = 0,2 \text{ mol}$$

Assim:



Como a constante de equilíbrio não varia, é esperado que a massa de iodo permaneça a mesma. Além disso, vale que:

$$[\text{HCl}] = 0,2 \text{ mol} - 2x \approx 0,2 \text{ mol}$$

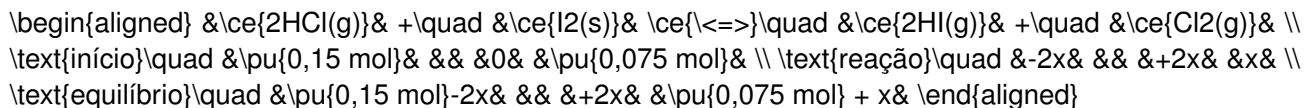
Substituindo na constante de equilíbrio:

$$K_c = \frac{\left(\frac{2x}{12\text{ L}}\right)^2 \cdot \frac{x}{12\text{ L}}}{\left(\frac{0,2\text{ mol}}{12\text{ L}}\right)^2} = 1,6 \times 10^{-34} \Rightarrow x \approx 2,7 \times 10^{-12} \text{ mol}$$

Assim, as quantidades são:

$n_{\text{HCl}} = 0,2 \text{ mol} \quad n_{\text{HI}} = 5,4 \times 10^{-12} \text{ mol} \quad n_{\text{HCl}} = 2,7 \times 10^{-12} \text{ mol} \quad n_{\text{I}_2} = 0,1 \text{ mol}$

- Observe que no caso anterior escapamos de resolver uma equação cúbica ao utilizar aproximações baseadas no fato da constante de equilíbrio da reação direta ser muito pequena. No caso da reação inversa isso não pode ser feito, então adotamos o seguinte procedimento: consideramos que a reação a partir dos produtos ocorreu totalmente, formando a quantidade máxima possível dos reagentes. Em seguida, o equilíbrio é calculado análogamente ao item anterior. O novo equilíbrio é



Analogamente ao item anterior,  $0,15 \text{ mol} - 2x \approx 0,15 \text{ mol}$ ,

$$K_c = \frac{\left(\frac{2x}{12 \text{ L}}\right)^2 \cdot \frac{0,075 \text{ mol} + x}{12 \text{ L}}}{\left(\frac{0,15 \text{ mol}}{12 \text{ L}}\right)^2} = 1,6 \times 10^{-34} \Rightarrow x \approx 1,2 \times 10^{-16} \text{ mol}$$

Assim, as quantidades são:

$$n_{\text{HCl}} = 0,15 \text{ mol} \quad n_{\text{HI}} = 2,4 \times 10^{-17} \text{ mol} \quad n_{\text{HCl}} = 0,075 \text{ mol} \quad n_{\text{I}_2} = 0,075 \text{ mol}$$

- A redução do volume desloca o equilíbrio no sentido da formação de HCl e I<sub>2</sub>, diminuindo o número de mols de gás. - Por ser mais eletronegativo que o iodo, o cloro possui maior tendência de estar na forma reduzida.

#### 4ª QUESTÃO

Superácidos são definidos como ácidos mais fortes que o ácido sulfúrico 100 %. Alguns superácidos possuem sínteses relativamente simples, como o [H<sub>2</sub>F<sup>+</sup>][SbF<sub>6</sub><sup>-</sup>], preparado pela reação entre o HF e o SbF<sub>5</sub>. Em um experimento, 3 mL de ácido fluorídrico anidro foram postos para reagir com 10 mL de SbF<sub>5</sub>.

- Apresente** as estruturas moleculares para todas as espécies envolvidas na reação.
- Determine** a geometria molecular para todas as espécies envolvidas na reação.
- Determine** a massa de superácido preparada no experimento.

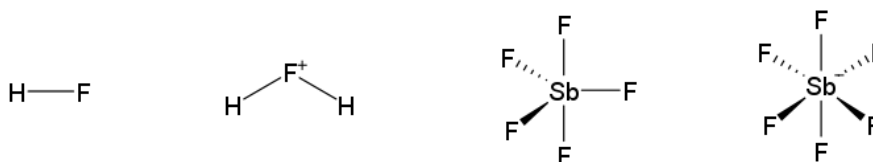
#### Dados

- Densidade do pentafluoreto de antimônio  $\rho_{\text{SbF}_5} = 3,1 \text{ g cm}^{-3}$
- Densidade do ácido fluorídrico  $\rho_{\text{HF}} = 0,97 \text{ g cm}^{-3}$

#### Gabarito

- Estruturas.
- Linear, bipiramidal trigonal, angular, octaédrica
- 18 g

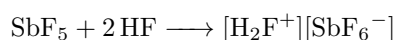
- As estruturas moleculares são:



a) As geometrias moleculares são:

( ) HF	SbF <sub>5</sub>	H <sub>2</sub> F <sup>+</sup>	SbF <sub>6</sub> <sup>-</sup>
( ) Linear	Bipiramidal trigonal	Angular	Octaédrica
( )			

a) A reação que ocorre é



A quantidade de HF e SbF<sub>5</sub> podem ser calculadas como:

$$\begin{aligned} n_{\text{HF}} &= \frac{\rho_{\text{HF}} \cdot V_{\text{HF}}}{M_{\text{HF}}} = \frac{0,97 \text{ g/cm}^3 \cdot 10 \text{ cm}^3}{20 \text{ g/mol}} = 0,145 \text{ mol} \\ n_{\text{SbF}_5} &= \frac{\rho_{\text{SbF}_5} \cdot V_{\text{SbF}_5}}{M_{\text{SbF}_5}} = \frac{3,10 \text{ g/cm}^3 \cdot 10 \text{ cm}^3}{216,75 \text{ g/mol}} = 0,143 \text{ mol} \end{aligned}$$

Como  $n_{\text{HF}}/2 < n_{\text{SbF}_5}$ , o HF é o reagente limitante, de forma que:

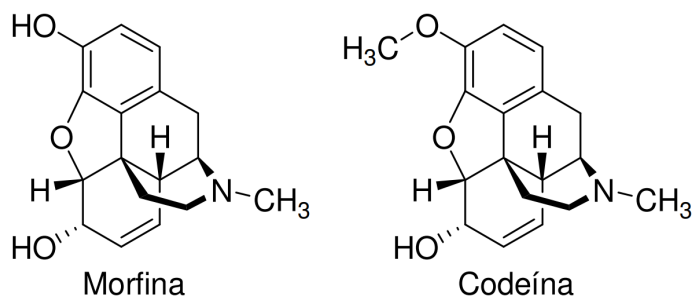
$$\frac{n_{\text{HF}}}{2} = n_{[\text{H}_2\text{F}^+][\text{SbF}_6^-]} = 0,0725 \text{ mol}$$

Finalmente:

$$m_{[\text{H}_2\text{F}^+][\text{SbF}_6^-]} = 18 \text{ g}$$

## 5ª QUESTÃO

A morfina e a codeína são compostos orgânicos da classe conhecida como opióides. Eles são fármacos amplamente utilizados no tratamento da dor.



- Identifique** as funções orgânicas presentes nesses compostos.
- Identifique** qual desses compostos é mais solúvel em água.
- Determine** o número de estereoisômeros para esses compostos.
- Apresente** um procedimento de separação desses compostos utilizando acetato de etila, solução de ácido clorídrico 1 mol L<sup>-1</sup> e solução de hidróxido de sódio 1 mol L<sup>-1</sup>.

## Gabarito

a) Morfina: éter, amina, álcool e fenol. Codeína: éter, amina e álcool.

b) Morfina.

c) 32

{=html} <!-- --> - Morfina: éter, amina, álcool e fenol. Codeína: éter, amina e álcool.

a) Morfina possui dois grupos OH e codeína apenas um. Portanto, morfina é mais solúvel em água.

b) Ambos os compostos possuem cinco carbonos quirais, assim, o número de isômeros é dado por:

$$\text{Número de isômeros} = 2^5 = 32$$

c) 1. Dissolve-se a mistura de morfina e codeína em acetato de etila.

2. Em seguida, adiciona-se a solução de NaOH. Dessa forma, a morfina, que possui hidroxila fenólica, reage com o hidróxido de sódio, formando um ânion fenolato, que é solúvel em água. Nessas condições a morfina fica concentrada na solução alcalina e a codeína fica concentrada na solução de acetato de etila (podem ser separadas).

3. Após evaporação da fase orgânica (acetato de etila) obtém-se a codeína pura.

4. A solução alcalina contendo a morfina desprotonada é então neutralizada, utilizando-se a solução de HCl. Nessas condições, protona-se novamente o fenol o que faz com que o composto deixe de ser solúvel em água e possa ser obtido de forma pura.