

## 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
-----------------------	------------------------	------------------------	------------------------	--------------------------	--------------------------	-------------------------	--------------------------	--------------------------	--------------------------	---------------------------

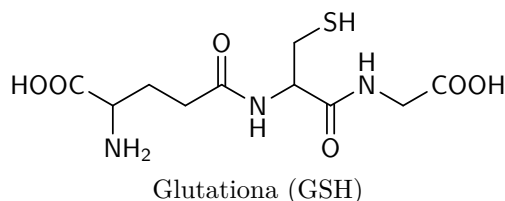
### Questão 1

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

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

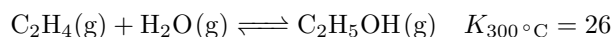


Os valores de  $pK_a$  da glutathiona são  $pK_{a1} = 2,12$  e  $pK_{a2} = 3,59$  para a desprotonação sucessiva dos dois grupos  $COOH$ ,  $pK_{a3} = 8,75$  para o grupo  $NH_2$  e  $pK_{a4} = 9,65$  para o grupo  $SH$ .

- (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,  $P^*(C_2H_5OH) = 60 \text{ Torr}$

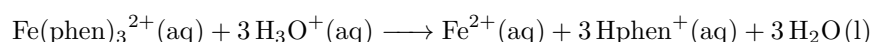
#### Questão 4

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,  $C_5H_{12}N$ . 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.
- a. A entalpia de reação é dada por:
- $$\Delta H_r =$$
- b.
- c.
- d.
- e. Os orbitais que participam do sistema aromático são os orbitais  $\pi$  dos carbonos do ciclo e o orbital  $p$  preenchido do nitrogênio.

#### 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 decompõe conforme a reação



Os experimentos a seguir foram realizados em 40 °C.

Exp.	$[Fe(phen)_3^{2+}]/M$	$[H_2O]/M$	$v_0/mM s^{-1}$
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  $8,5 \times 10^{-2} M s^{-1}$ .

- (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.