

Questão 01

Considere a estrutura hidrogenóide do íon de Hélio ( $Z=2$ ),  $\text{He}^+$ .

- (0,5) Calcule a energia do estado fundamental
- (0,5) Calcule o comprimento de onda da transição eletrônica do primeiro estado excitado para o estado fundamental. A radiação emitida seria perceptível ao olho humano? Justifique sua resposta
- (0,25) Calcule a energia de ionização

Dados (**nem todos os dados fornecidos são necessários. Escolha-os corretamente**):

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

$$m_e = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$e_0 = 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$c = 2,99 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$$

$$R = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ Hz} = 10,9 \text{ m}^{-1}$$

$$1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$a_0 = 0,529 \text{ \AA}$$

$$N_A = 6,02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

Questão 2

(1,25 Ponto) Desenhe a estrutura de Lewis, preveja o arranjo eletrônico segundo o conceito de repulsão entre pares de elétrons na camada de valência (RPENV), determine os números de domínios de elétrons, topologia e demonstre as geometrias os compostos citados abaixo:

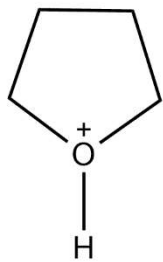
a) (0.42)  $\text{CH}_4$

b) (0.42)  $\text{SF}_4$

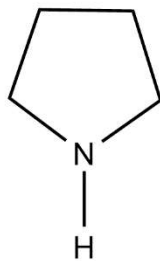
c) (0.42)  $\text{BF}_3$

Questão 3

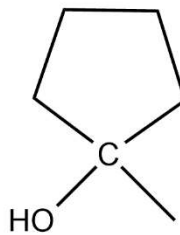
Classifique as substâncias abaixo em ordem decrescente de acidez. Represente as estruturas das bases conjugadas. (1,25 pontos)



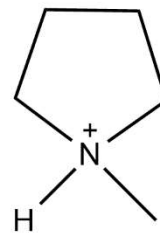
**A**



**B**



**C**

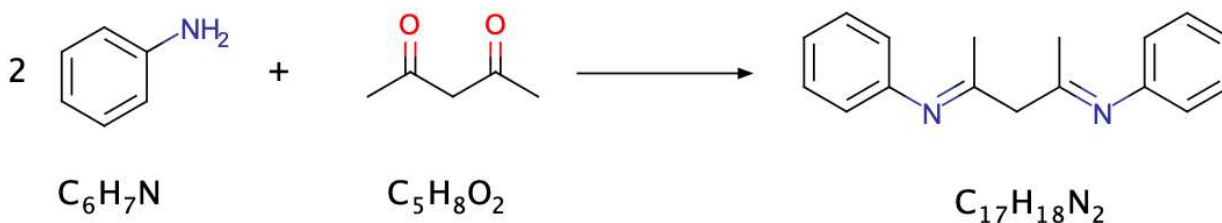


**D**

Questão 4

a) Na reação de preparação da imina abaixo, foram utilizados 6,38 mL de anilina e 4,02 g de 2,4-pentadiona. Sabendo-se que foram obtidos 6,65 g do produto, calcule o rendimento da reação.

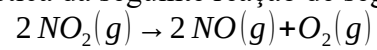
Dados de massa atômica: C = 12, O = 16, H = 1, N = 14; Densidade da anilina: 1,02 g/mL. (0,75 ponto)



b) O rendimento mudaria se fossem utilizados 7,50 g da 2,4-pentadiona? Justifique. (0,5 ponto)

Questão 5

(1,25 ponto) A constante cinética da seguinte reação de segunda ordem,



é  $6,3 \times 10^2 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$  na temperatura de 600 K. Se a pressão inicial de  $\text{NO}_2(g)$  é 760 torr, quanto tempo levará para que 20% do  $\text{NO}_2(g)$  se decomponha. Admita que as espécies são gases ideais. Dados:  $R = 8,314 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ ,  $1 \text{ atm} = 101325 \text{ Pa} = 760 \text{ torr}$ .

### Questão 6

Num reator a seguinte reação ocorre a 350 K,  $2HI(g) \rightleftharpoons H_2(g) + I_2(g)$ . Quando atingido o equilíbrio há 1 mol de  $H_2(g)$  no reator. Sabendo que as pressões parciais iniciais eram  $P_{H_2} = 1\bar{c}$ ,  $P_{I_2} = 3\bar{c}$  e  $P_{HI} = 2\bar{c}$ . Estime o volume do reator.

Assuma que entre 298 K e 350 K as entalpias de formação das substâncias dependam pouco da temperatura.

Dados termodinâmicos a 298 K:  $\Delta_f G_{HI(g)}^0 = +1,70 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta_f G_{I_2(g)}^0 = +19,33 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta_f H_{HI(g)}^0 = 26,48 \text{ kJ mol}^{-1}$ ,  $\Delta_f H_{I_2(g)}^0 = +62,44 \text{ kJ mol}^{-1}$ .

### Questão 7

Na determinação de cloreto em água potável, uma solução de nitrato de prata foi padronizada com 0,1116 g de NaCl, puro e seco, adicionando cromato de potássio (1 mL), gastando-se 18,01 mL de nitrato de prata até a observação do ponto final (mudança de coloração, de levemente amarelada para levemente avermelhada).

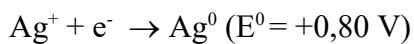
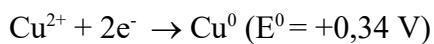
Da amostra de água potável, 100 ml foram depositados em um erlenmeyer, adicionando 15,00 mL de água deionizada e cromato de potássio (1 mL), na realização da titulação com a solução de nitrato de prata padronizada foram necessários 20,15 mL para alcançar o ponto final da titulação (caracterizado pela mudança de coloração, de levemente amarelada para levemente avermelhada).

Dados massas atômicas ( $\text{g mol}^{-1}$ ): Na = 23,00; Cl = 35,50; Ag = 107,87; N = 14,007; O = 16,00.

- a) Apresente a reação química que acontece na titulação entre analito e titulante, e a reação que acontece entre titulante e indicador. **(0,40 pts.)**
- b) Calcule a concentração média de  $\text{Cl}^-$  na amostra em  $\text{mg L}^{-1}$ . **(0,55 pts.)**
- c) Considerando o resultado obtido, e a norma técnica para o conteúdo máximo de cloreto na água potável ( $250,00 \text{ mg L}^{-1}$ ), a água analisada é apropriada para o consumo humano? Justifique. **(0,30 pts.)**

Questão 8

Limbas de cobre metálico em excesso foram adicionadas à 50,00 mL de uma solução contendo nitrato de prata ( $\text{Ag}^+$   $0,03 \text{ mol L}^{-1}$ ). A mistura foi então agitada até que fosse atingido o equilíbrio. A partir dos dados abaixo responda aos seguintes itens:



$$E = E^0 - (0,0592/n) \times \log Q$$

$$K = 10^{(nE)/0,0592\text{V}}$$

- Encontre a equação química para a reação global e calcule o valor da constante de equilíbrio para o processo à  $25^\circ\text{C}$ . (0,30 ponto)
- Determine as concentrações aproximadas de equilíbrio dos íons metálicos  $\text{Ag}^+$  e  $\text{Cu}^{2+}$ . (0,50 ponto)
- Determine o potencial em volts para a pilha  $\text{Cu} | \text{Cu}^{2+} (0,05 \text{ mol L}^{-1}) | \text{Ag}^+$ . (0,45 ponto)

Edital PPGQ 02/2023 – Provas aplicadas no dia 19/06

Gabarito Questão 1

a) No estado fundamental,  $n = 1$ , e:

$$E_{\text{fundamental}} = \frac{-Z^2 h m_e e^4}{8 h^3 \epsilon_0^2 n^2} = -4 \times 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} = -8,6811 \times 10^{-18} \text{ J} = -54,19 \text{ eV}$$

b) na transição de  $n=2$  para  $n=1$

$$\Delta E = \frac{-Z^2 h m_e e^4}{8 h^3 \epsilon_0^2} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) = -4 \times 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \text{ (negativo, emissão)}$$

$$\lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 2,99 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}}{6,5108 \cdot 10^{-18} \text{ J}} = 3,053 \times 10^{-8} \text{ m} = 30,53 \text{ nm}$$

Não é visível por estar na região do UV.

c) ionização corresponde a uma transição de  $n=1$  para  $n=\infty$

$$\Delta E_{\text{ion.}} = \frac{-Z^2 h m_e e^4}{8 h^3 \epsilon_0^2} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) = -4 \times 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \text{ (positivo; absorção)}$$

Gabarito Questão 2

a) 4 Domínios de  $e^-$ ; 4 Domínios de  $e^-$  ligantes; 0 Domínios de  $e^-$  não-ligantes;  
Topologia: Tetraedral; Geometria: Tetraédrica.

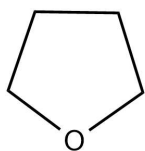
b) 5 Domínios de  $e^-$ ; 4 Domínios de  $e^-$  ligantes; 1 Domínios de  $e^-$  não-ligantes;  
Topologia: Bipiramidal Trigonal; Geometria: Gangorra.

c) 3 Domínios de  $e^-$ ; 3 Domínios de  $e^-$  ligantes; 0 Domínios de  $e^-$  não-ligantes;  
Topologia: Trigonal Plana; Geometria: Trigonal Plana.

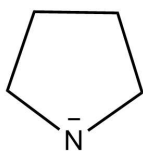
Gabarito Questão 3

Ordem decrescente de acidez:  $A > D > C > B$

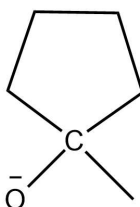
Bases Conjugadas



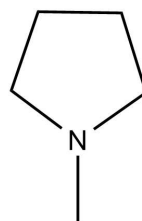
A



B



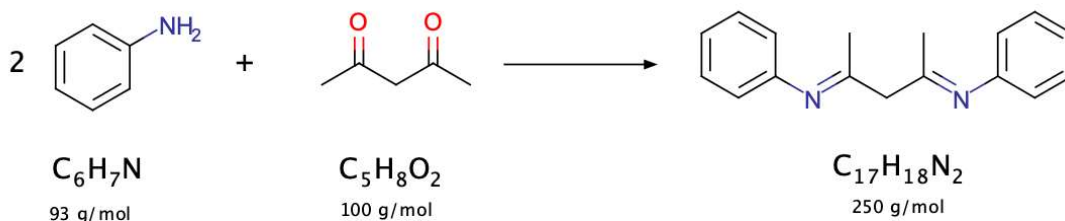
C



D

Gabarito Questão 4

a) anilina: densidade =  $1,02 \text{ g/mL} \times 6,38 \text{ mL} = 6,51 \text{ g}$



$6,38 \text{ mL} = 6,51 \text{ g} = 0,07 \text{ mol}$

$4,02 \text{ g} = 0,04 \text{ mol}$

Sabendo-se que nesta reação são necessários 2 mol de anilina para reagir com 1 mol de 2,4-pentadiona, 0,04 mol de 2,4-pentadiona necessitariam de 0,08 mol de aldeído para reagir. Sendo assim, a cetona está em excesso e a amina é o reagente limitante.

Massa esperada do produto:

$2 \times 93 \text{ g de amina} - 250 \text{ g de produto}$

$6,51 \text{ g de amina} - X \text{ g de produto}$

$X = 8,75 \text{ g de produto}$

Rendimento:

$8,75 \text{ g de produto} - 100\%$

$6,65 \text{ g de produto} - \text{Rendimento}$

$\text{Rendimento} = 76\%$

b) O rendimento não se alteraria, porque está se colocando mais massa do reagente que já estava em excesso. O reagente limitante e o rendimento permanecem os mesmos.

Gabarito Questão 5

Gabarito Questão Cinética Química

Reação de 2ª ordem:  $t = \frac{1}{k} \left( \frac{1}{[NO_2]} - \frac{1}{[NO_2]_0} \right)$

Seja  $X = [NO_2]$ , queremos

$$t_{20} = \frac{1}{k} \left( \frac{1}{0,2 X_0} - \frac{1}{X_0} \right) = \frac{1}{k X_0} \left( \frac{1}{0,2} - 1 \right) = \frac{4}{k X_0}$$

Ainda,  $X_0 = \frac{n_0}{V} = \frac{P_0}{RT} = \frac{760 \text{ torr}}{(8,314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1})(600 \text{ K})}$

$$X_0 = 0,152 \frac{\text{torr mol}}{\text{J}} \left( \frac{\text{J}}{\text{Pa m}^3} \right) \left( \frac{101325 \text{ Pa}}{1 \text{ atm}} \right) \left( \frac{1 \text{ atm}}{760 \text{ torr}} \right) \left( \frac{1 \text{ m}^3}{10^6 \text{ cm}^3} \right)$$

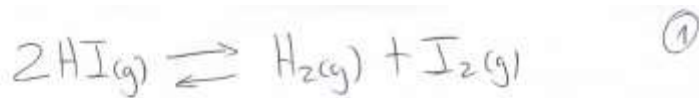
$$X_0 = 2,031 \times 10^{-5} \text{ mol} \cdot \text{cm}^{-3}$$

Finalmente,

$$t_{20} = \frac{4}{(6,3 \times 10^2 \text{ cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})(2,031 \times 10^{-5} \text{ mol} \cdot \text{cm}^{-3})}$$

$t_{20} = 312,6 \text{ s}$

Gabarito Questão 6



$$\Delta_r G^\circ = \Delta_f G^\circ_{\text{H}_2(g)} + \Delta_f G^\circ_{\text{I}_2(g)} - 2 \Delta_f G^\circ_{\text{HI}(g)}$$

$$\Delta_r G^\circ = +19,33 - 2 \cdot 1,70 = 15,93 \text{ kJ}$$

$$\ln K_p_{298\text{K}} = -\Delta_r G^\circ / RT = -\frac{15,93 \cdot 1000}{8,3 \cdot 298} = -6,44$$

$$\frac{\ln K_p(T_2)}{\ln K_p(T_1)} = -\frac{\Delta_r H^\circ}{R} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

$$\Delta_r H^\circ = \Delta_f H^\circ_{\text{H}_2(g)} + \Delta_f H^\circ_{\text{I}_2(g)} - 2 \Delta_f H^\circ_{\text{HI}(g)}$$

$$\Delta_r H^\circ = 62,44 - 2 \cdot 26,48 = 9,48 \text{ kJ}$$

$$\frac{\ln K_p_{350\text{K}}}{-6,44} = \frac{-9,48 \cdot 1000}{8,3} \left[ \frac{1}{350} - \frac{1}{298} \right]$$

$$\ln K_p_{350\text{K}} = -6,44 \cdot 0,57 \Rightarrow K_p = e^{-3,67} = 0,025$$

$$K_p = \frac{(x+1)(x+3)}{(2-2x)^2}$$

②

$$0,025 = \frac{x^2 + 4x + 3}{4 - 8x + 4x^2}$$

$$x^2 + 4x + 3 = 0,1 - 0,2x + 91x^2$$

$$0,9x^2 + 4,2x + 2,9 = 0$$

$$\frac{-4,2 \pm \sqrt{(4,2)^2 - 4 \cdot 0,9 \cdot 2,9}}{2 \cdot 0,9}$$

$$\frac{-4,2 \pm \sqrt{7,21}}{1,8} \rightarrow \begin{cases} \frac{-4,2 - 2,69}{1,8} = -3,82 \\ \frac{-4,2 + 2,69}{1,8} = -0,84 \end{cases}$$

$$x = -0,84 \text{ bar}$$

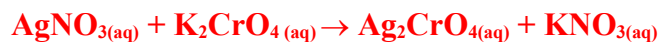
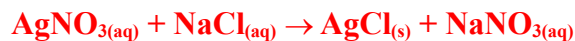
$$P_{H_2} = x + 1 = -0,84 + 1 = 0,16 \text{ bar}$$

$$PV = n_{H_2} RT \Rightarrow 0,16 V = 1 \cdot 0,083 \cdot 350$$

$$V = 181,56 \text{ litros}$$

#### Gabarito Questão 7

- a) Apresente a reação química que acontece na titulação entre analito e titulante, e a reação que acontece entre titulante e indicador. **(0,40 pts.)**



- b) Calcule a concentração média de  $\text{Cl}^-$  na amostra em  $\text{mg L}^{-1}$ . **(0,55 pts.)**

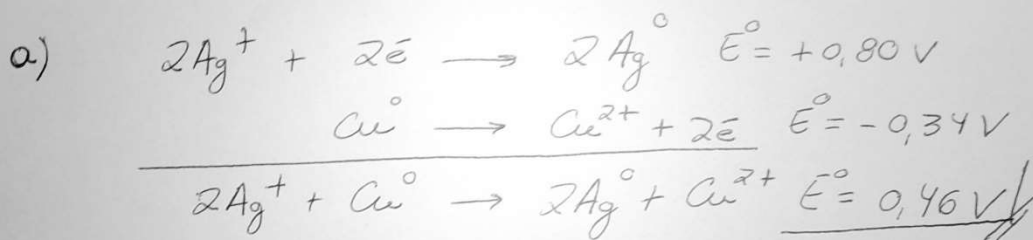
$$757,7 \text{ mg Cl L}^{-1}$$

- c) Considerando o resultado obtido, e a norma técnica para o conteúdo máximo de cloreto na água potável ( $250,00 \text{ mg L}^{-1}$ ), a água analisada é apropriada para o consumo humano? Justifique. **(0,30 pts.)**

$$757,7 \text{ mg Cl L}^{-1} > 250,00 \text{ mg L}^{-1}$$

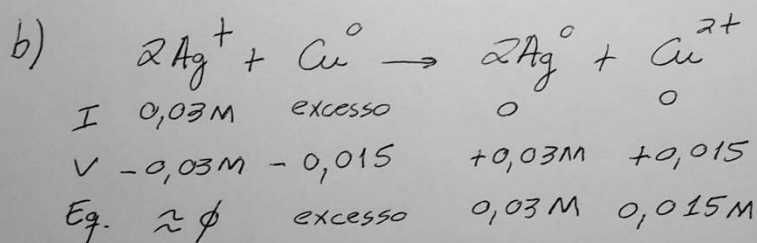
**Então a água analisada não é apropriada para consumo humano**

Gabarito Questão 8



$$K = 10^{(2 \times 0,46\text{V} / 0,0592\text{V})} \quad \approx \quad K = 10^{15,54}$$

$$\underline{K = 3,5 \times 10^{15}}$$



$$[\text{Cu}^{2+}] \approx 0,015 \text{ mol/L}$$

$$[\text{Ag}^+] \approx 0,00 \text{ mol/L}$$

$$K = \frac{[\text{Cu}^{2+}]}{[\text{Ag}^+]^2} = \frac{0,015}{[\text{Ag}^+]^2} = 3,5 \times 10^{15}$$

$$[\text{Ag}^+] = \sqrt{\frac{0,015}{3,5 \times 10^{15}}} = 2,07 \times 10^{-9} \text{ mol/L}$$

$$c-) E = E^{\circ} - \frac{0,0592V}{n} \cdot \log Q$$

$$E = 0,46V - \frac{0,0592V}{2} \cdot \log \frac{C_{Cu^{2+}}}{(C_{Ag^+})^2}$$

$$E = 0,46V - \frac{0,0592V}{2} \cdot \log \frac{0,05}{(0,03)^2}$$

$$E = 0,46V - \left( \frac{0,0592V}{2} \cdot 1,74 \right)$$

$$\underline{E = 0,408V}$$