



Universidade Federal do Ceará
Centro de Ciências
Programa de Pós-Graduação em Química
Caixa Postal 12.200 – Tel. (085)3366.9981
CEP – 60.450-970 – Fortaleza - Ceará - Brasil

EXAME DE SELEÇÃO PARA O PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ (PPGQ-UFC)/2014.1

Data: 22/06/2015

Horário: 14:00 h

Instruções gerais:

1. A prova consta de 08 (oito questões).
2. A duração da prova é de 3 horas.
3. Cada questão deve ser respondida na própria folha (frente e verso) do enunciado. Não serão corrigidas questões fora do espaço reservado às respostas.
4. Só serão consideradas as provas realizadas a caneta.
5. Será permitido consulta à tabela periódica, em anexo.
6. Será permitido o uso de calculadora.
7. NÃO será permitido o uso de celular ou outros aparelhos eletrônicos durante a prova. Portanto, tais aparelhos deverão permanecer desligados.
8. O nome do candidato deverá ser preenchido apenas na primeira folha. Os outros espaços são reservados à comissão da seleção.

NOME DO CANDIDATO:

RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

1ª Questão: Os pontos de fusão dos compostos HCl, HBr e HI aumentam com o aumento da massa molar enquanto um comportamento inverso é observado para os compostos NaCl, NaBr e NaI. Explique.

RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

2ª Questão: Admitindo como desprezíveis as superposições entre orbitais de fronteira cujas diferenças de energia são superiores a 14 eV, determine, a partir do diagrama semi-quantitativo de orbitais moleculares da molécula de HF, a ordem de ligação desta molécula e explique a polaridade usando *apenas* argumentos baseados na Teoria do Orbital Molecular (*não fazer uso do conceito de eletronegatividade*).

RESERVADO À COMISSÃO

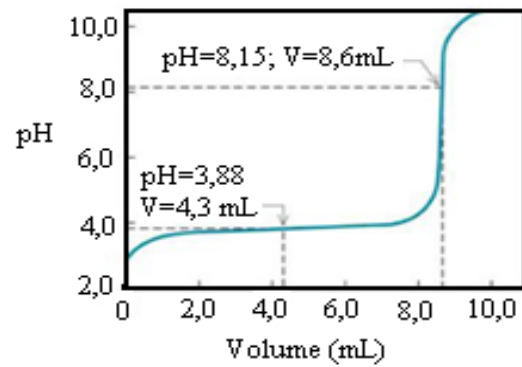
CÓDIGO:

3ª Questão: O teor máximo permitido para descarte de Cr(VI) em efluentes, pelas leis vigentes (Resolução CONAMA N^o 430/2011) é de $0,1 \text{ mg L}^{-1}$. Uma Galvanoplastia liberou 20 litros de uma solução contendo 10^{-4} mol de dicromato de potássio em um riacho. O órgão ambiental responsável pela fiscalização deve multar esta indústria? Justifique sua resposta através de cálculos.

RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

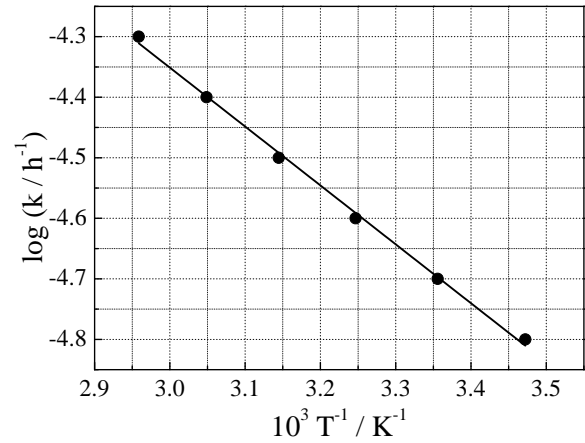
4ª Questão: A titulação de 39,60 mg de uma amostra de um ácido fraco desconhecido com NaOH 0,1 mol L⁻¹ como titulante apresentou a curva de titulação ao lado. A partir de justificativas numéricas, determine a massa molar do ácido desconhecido e o respectivo valor de Ka.



RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

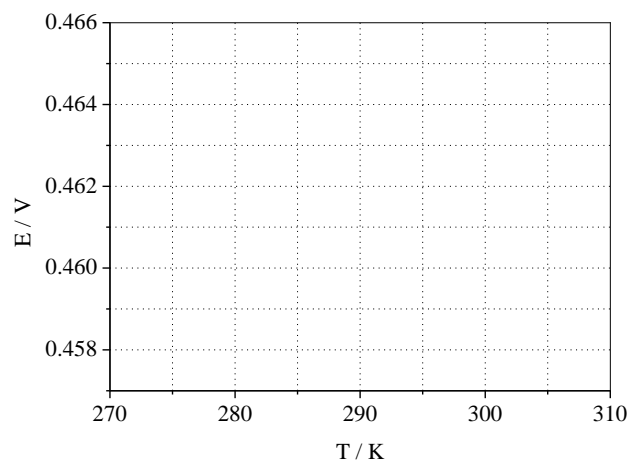
5ª Questão: Considerando a concentração inicial de um dado fármaco como sendo 108 unidades mL^{-1} , observou-se experimentalmente que, se a concentração diminuir abaixo de 56 unidades mL^{-1} , este fármaco não será eficiente e não deverá ser consumido. Por estas informações e com o auxílio do gráfico ao lado, qual é o prazo de validade que deve ser estipulado para este fármaco a 25 °C? Justifique numericamente.



RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

6ª Questão: O gráfico ao lado mostra a influência da temperatura na força eletromotriz da célula $\text{Pt}|\text{H}_2(1 \text{ bar})|\text{HCl}_{\text{aq}}(0,01 \text{ mol L}^{-1})|\text{MCl}(\text{s})|\text{M}(\text{s})$. A partir da análise deste gráfico, calcule ΔG^0 , ΔS^0 e ΔH^0 para a reação da célula a $25 \text{ }^\circ\text{C}$.



RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

7ª Questão: Dois íons complexos (A e B) foram sintetizados a partir de reações entre íons de Fe e as bases de Lewis CN^- e Cl^- . Tais compostos apresentaram as seguintes características:

Composto A: (i) momento magnético (μ) igual a 0,0; (ii) bandas atribuídas a transições de transferência de carga do tipo MLCT (*Metal-to-Ligand Charge-Transfer*).

Composto B: (i) $\mu = 5,92$; (ii) bandas atribuídas a transições de transferência de carga do tipo LMCT (*Ligand-to-Metal Charge-Transfer*).

Sabendo que os íons complexos sintetizados apresentam, além do centro de inversão (i), os eixos de rotação própria C_4 , C_3 e C_2 , pede-se:

- As fórmulas químicas;
- As energias de estabilização de campo ligante (EECL) em função da energia de emparelhamento (P) e do parâmetro de desdobramento de campo ligante (Δ_o).
- O íon complexo que deve apresentar maior valor de Δ_o . Justifique com base na Teoria de Campo Ligante (TCL).

RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

8ª Questão: Quando o (2*R*,3*S*)-2-bromo-3-metilpentano é tratado com etóxido de sódio, somente dois alcenos são obtidos como produtos. Considerando este um processo bimolecular, apresente o que se pede:

- (a) a estrutura dos produtos formados, levando em consideração os aspectos estereoquímicos;
- (b) o nome dos produtos apresentados no item anterior, de acordo com as normas da UIQPA;
- (c) o diagrama de energia para esta reação.

RESERVADO À COMISSÃO

CÓDIGO:

FÓRMULAS	CONSTANTES	UNIDADES
$\left(\frac{\partial \Delta G}{\partial T}\right)_p = -nF \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_p$	$m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$	$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$
$\Delta S = nF \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_p$	$e = 1,60 \times 10^{-19} \text{ C}$	$1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$
$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$	$c = 3,0 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$	$1 \text{ eV} = 1,60 \times 10^{-19} \text{ J}$
$\mu = \sqrt{N(N+2)}$	$R = 1,0967758 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$	$0 \text{ }^\circ\text{C} = 273 \text{ K}$
$k = \frac{2,303}{t} \log \frac{c_o}{c}$	$F = 96.500 \text{ C mol}^{-1}$	
$(EECL)t_2^x e_g^y = [x(-0,4) + y(0,6)]\Delta_o \quad \therefore (EECL)e^x t_2^y = [x(-0,6) + y(0,4)]\Delta_t$		

k é a constante de velocidade da reação de degradação, t é o tempo, c_o é a concentração inicial do fármaco e c é a concentração de fármaco em um dado tempo. N = Número de elétrons não emparelhados.

Tabela – Energia potencial de orbitais atômicos mais externos de alguns elementos do segundo período, além de hidrogênio.

Nº Atômico	Elemento	Energia potencial de orbitais atômicos (eV)		
		1s	2s	2p
1	H	-13,61		
3	Li		-5,39	
6	C		-19,43	-10,66
7	N		-25,56	-13,18
8	O		-32,38	-15,85
9	F		-40,17	-18,65

1A																		8A	
1	2											13	14	15	16	17	2		
H	He											3A	4A	5A	6A	7A	He		
1.008	4.003											5	6	7	8	9	10		
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne		
6.941	9.012											10.81	12.01	14.01	16.00	19.00	20.18		
		3	4	5	6	7	8	9	10	11	12								
		Transition metals										13	14	15	16	17	18		
												Al	Si	P	S	Cl	Ar		
												26.98	28.09	30.97	32.07	35.45	39.95		
		19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
		K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
		39.10	40.08	44.96	47.88	50.94	52.00	54.94	55.85	58.93	58.69	63.55	65.38	69.72	72.59	74.92	78.96	79.90	83.80
		37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
		Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
		85.47	87.62	88.91	91.22	92.91	95.94	(98)	101.1	102.9	106.4	107.9	112.4	114.8	118.7	121.8	127.6	126.9	131.3
		55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
		Cs	Ba	La*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
		132.9	137.3	138.9	178.5	180.9	183.9	186.2	190.2	192.2	195.1	197.0	200.6	204.4	207.2	209.0	(209)	(210)	(222)
		87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115			
		Fr	Ra	Ac†	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup			
		(223)	226	(227)	(261)	(262)	(263)	(264)	(265)	(268)	(271)	(272)							