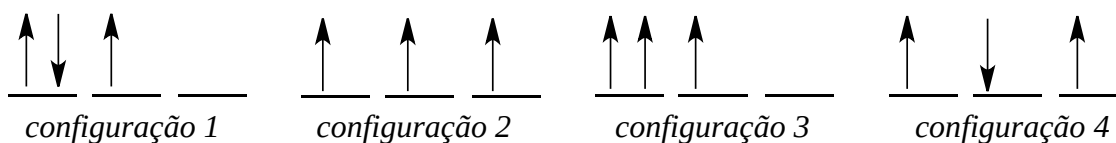


PROVA DE SELEÇÃO DO MESTRADO DO PPGQ-UFRRJ – 2024.1

QUESTÃO 1. Considere os seguintes estados possíveis para a configuração p^3 :



(a) Quais desses estados representam o estado fundamental?

(b) Quais são estados excitados?

(c) Quais são estados impossíveis?

Forneça uma breve justificativa para a suas escolhas

QUESTÃO 2. Considere as seguintes moléculas e faça o que se pede justificando adequadamente suas respostas: i) NCl_3 ; ii) COCl_2 ; iii) SF_4 .

(a) Desenhe as estruturas de Lewis;

(b) Determine a geometria em torno do átomo central (desenhando e nomeando).

QUESTÃO 3. Explique a tendência observada para a primeira energia de ionização e raio atômico dos elementos do segundo período da tabela periódica (do lítio ($Z=3$) até o flúor ($Z=9$)). Utilize os conceitos de blindagem, penetração e/ou carga nuclear efetiva para explicar as tendências observadas, assim como as exceções observadas ao longo deste período.

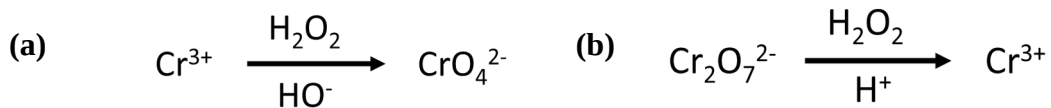
QUESTÃO 4. A ionização a 25°C de uma série de ácidos carboxílicos foi estudada e os dados de pK_a encontram-se registradas na tabela abaixo.

Ácido	pK_a
CH_3COOH	4,73
CH_2ClCOOH	2,28
CHCl_2COOH	1,28
CCl_3COOH	0,52

(a) Com base em argumentos estruturais, explique a ordem de acidez apresentada.

(b) Calcule o pH de uma solução $0,02 \text{ mol L}^{-1}$ de ácido acético. Faça o mesmo para uma solução de ácido tricloroacético com concentração idêntica. Os valores de pH estão coerentes com acidez relativa encontrada no item (a) para essas espécies?

QUESTÃO 5. O peróxido de hidrogênio pode atuar como agente redutor ou oxidante em soluções aquosas, conforme o pH da solução e da natureza dos reagentes envolvidos. Escreva as reações iônicas balanceadas dos processos representados a seguir e identifique o comportamento do peróxido de hidrogênio em cada caso (se redutor ou oxidante).



QUESTÃO 6. O ácido sórbico ($\text{C}_5\text{H}_7\text{CO}_2\text{H}$; $112,12 \text{ g mol}^{-1}$; $\text{pK}_a = 4,76$) e seus sais de sódio, potássio e cálcio têm ação efetiva sobre fermentos e fungos. Por esta razão, estes compostos são bastante empregados na conservação de alimentos. Apesar da baixa toxicidade do ácido sórbico, a sua concentração nos alimentos deve ser controlada devido ao seu potencial alergizante. A análise espectrofotométrica tem sido recomendada para a determinação do ácido sórbico. Para esta análise, um profissional de laboratório preparou uma solução padrão dissolvendo $30,0 \text{ mg}$ de sorbato de sódio ($\text{C}_5\text{H}_7\text{CO}_2\text{Na}$; $134,12 \text{ g mol}^{-1}$), um sal derivado do ácido sórbico, em $100,00 \text{ mL}$ de água.

Qual o pH desta solução padrão?

QUESTÃO 7. Alterações na concentração de prótons (H^+) podem causar modificações na estrutura das proteínas e assim impedir, temporariamente ou definitivamente, o funcionamento normal das atividades celulares. Por essa razão, o pH dos fluidos biológicos é mantido sempre constante e dentro de uma faixa estreita através da presença dos tampões biológicos. Nesse sentido, destaca-se o H_2PO_4^- , que funciona como um tampão intracelular devido a sua alta concentração no interior desse compartimento. Sobre o H_2PO_4^- , responda o que se pede:

- (a) Escreva a equação do equilíbrio de transferência de prótons em água e identifique seus pares ácido-base conjugados.
 (b) Quais características químicas tornam o H_2PO_4^- um bom tampão para as células?

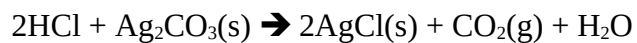
QUESTÃO 8. Os compostos *p*-nitro-fenol ($p\text{-NO}_2\text{C}_6\text{H}_4\text{OH}$), fenol ($\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}$) e metanol (CH_3OH) contêm todos um grupo OH ligado em C, mas o pK_a deles é bem diferente ($7,14$, $9,89$ e $15,54$, respectivamente).

Explique a diferença, usando o conceito de ressonância.

QUESTÃO 9. Use conceitos de interações intermoleculares.

- (a) Explique a seguinte ordem de pontos de ebulição: $\text{CH}_3\text{CH}_3 < \text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl} < \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$.
 (b) Como você prevê que o ponto de ebulição do $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{I}$ se colocaria nessa sequência? Explique.

QUESTÃO 10: Ao se adicionar 50,0 mL de HCl 1,00 mol L⁻¹ com 13,75 g de Ag₂CO₃ (sólido branco), seguido de agitação vigorosa e aquecimento, ocorre a formação do AgCl (sólido branco), conforme a reação:



O sólido branco observado no final da reação foi convenientemente filtrado, lavado e pesado.

Dados: MM Ag₂CO₃ = 275 g mol⁻¹; MM AgCl = 143 g mol⁻¹

Determine o percentual, em g/100g, de AgCl no sólido obtido.