

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE QUÍMICA
Programa de Pós-Graduação em Química

Prova de Seleção para as Turmas de Mestrado e Doutorado 2024.2

Questão 1. O modelo de Bohr descreve o átomo como um núcleo pequeno e carregado positivamente, cercado por elétron em órbitas circulares com valores definidos de energia, expressa (em eV, para o átomo de hidrogênio) por:

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2}$$

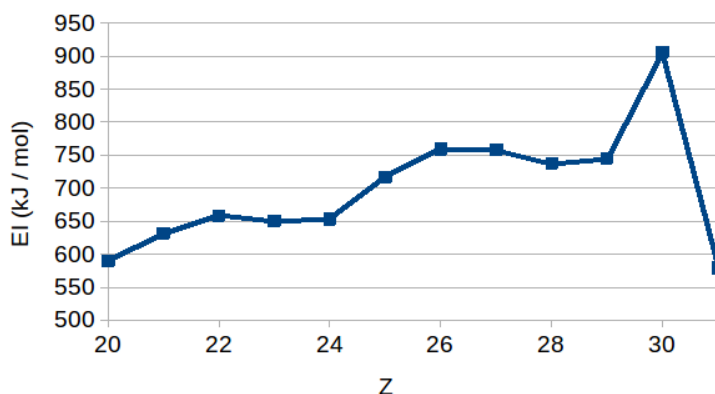
Dados: Constante de Planck $h = 6,62 \times 10^{-34} \text{ J s}$

Velocidade da luz $c = 3,0 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$

Conversão de unidade $1 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}$

Conhecendo a expressão de Planck ($\Delta E = h\nu$), calcule o comprimento de onda (em nm) do fóton associado com a transição $n = 2 \rightarrow n = 3$ no átomo de hidrogênio.

Questão 2. Observe os valores de primeira energia de ionização (EI, em kJ/mol) para os metais ($Z = 20$ até $Z = 31$, gráfico abaixo):



a) Explique a tendência geral de aumento da energia de ionização em função de Z.

b) Apresente a configuração eletrônica do elemento $Z = 24$.

Questão 3. Uma amostra de 0,964 g de bauxita foi completamente dissolvida de modo a preparar 250,00 mL de solução. A concentração de alumínio presente na solução, determinada por espectrometria, foi de $0,0656 \text{ mol L}^{-1}$.

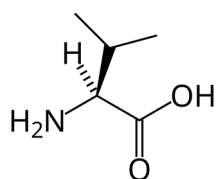
Calcule o teor de óxido de alumínio ($101,96 \text{ g mol}^{-1}$), em %m/m, na bauxita.

Questão 4. Proteínas são formadas por resíduos de aminoácidos sequencialmente unidos entre si por ligações covalentes, denominadas ligações peptídicas. Contudo, para que possam exercer a sua função no organismo, as proteínas necessitam estar em uma conformação (forma tridimensional) ótima estabelecida por interação específicas entre radicais de aminoácidos.

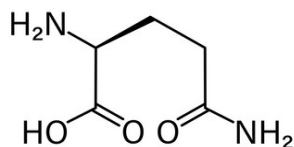
O processo de desnaturação de proteínas envolve modificações conformacionais em suas estruturas provocadas por altas temperaturas, variações de pH do meio, estresse físico, etc, caracterizando a perda de função proteica.

Duas soluções proteicas aquosas, cada uma contendo um tipo de proteína, foram aquecidas a 68°C e resfriadas lentamente. A proteína A teve parte de sua função reestabelecida com o resfriamento, enquanto a proteína B não teve sua atividade reestabelecida.

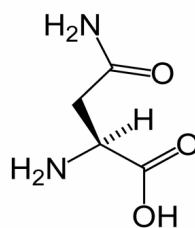
Sabendo que uma das proteínas é rica em aminoácido valina e a outra é rica em aminoácidos glutamina e asparagina, **indique, usando seu conhecimento sobre interações intermoleculares, qual delas é a proteína A e qual é a proteína B.**



Valina



Glutamina



Asparagina

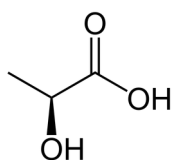
Questão 5. Uma solução de trabalho, contendo $100 \text{ mg F}^-/\text{L}$, foi preparada a partir de diluição apropriada de uma solução padrão concentrada de NaF.

Dados:	Massa atômica (F, g mol^{-1})	18,998
	pKa (HF)	3,17

Qual o pH da solução de trabalho?

Questão 6. Por se tratar de uma atividade física intermitente realizada por meio de exercícios de intensidades variadas, o futebol apresenta um componente láctico importante durante o jogo.

A medição de lactato no sangue tem sido um parâmetro metabólico frequentemente utilizado para quantificar a intensidade de esforço realizado pelo atleta. Durante o exercício físico intenso o pH do sangue periférico pode ir a valores inferiores a 7,0 pela formação de ácido láctico ($pK_a = 3,8$; fórmula estrutural dada abaixo) durante o metabolismo anaeróbico.



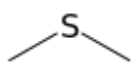
Ácido láctico

Contudo, mecanismos compensatórios como a hiperventilação do pulmão acelerando as trocas gasosas entre o oxigênio molecular que inspiramos e o dióxido de carbono que expiramos corrigem este desequilíbrio.

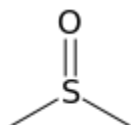
a) De acordo com conceitos sobre equilíbrio químico envolvendo o gás carbônico expirado e o bicarbonato presente nos fluidos celulares, explique o papel da liberação de CO_2 para a manutenção do pH sanguíneo entre 7,35 e 7,45 para corrigir esse quadro de acidose; explicitando as transformações ocorridas no texto e as reações que ocorrem.

b) Outro fator responsável por um quadro de acidose é vômito e/ou diarreia excessivos, com perda de bicarbonato. Novamente a fim de corrigir esta situação o pulmão hiperventila, recebendo o auxílio dos rins para a retenção de bicarbonato e excreção de H^+ na forma de íons amônio. Explique através do conceito de equilíbrio químico as transformações ocorridas no texto explicitando as reações que ocorrem.

Questão 7. O enxofre pode formar uma variedade de compostos organossulfurados, como o dimetilsulfureto e o dimetilsulfóxido (estruturas abaixo). Considerando as estruturas, responda abaixo.



dimetilsulfureto



dimetilsulfóxido

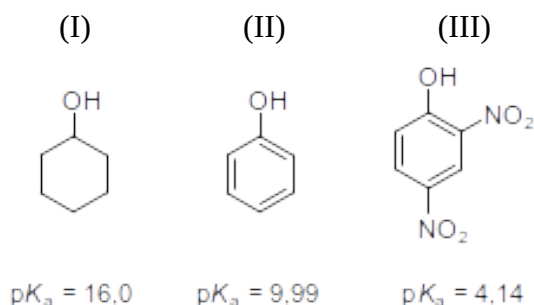
(a) **Desenhe as estruturas de Lewis dos dois compostos.**

(b) Utilizando o modelo de repulsão dos pares de elétrons da camada de valência (VSEPR), indique as geometrias dos compostos.

Questão 8. Os valores de ponto de fusão e ponto de ebulição, de dimetilsulfureto e o dimetilsulfóxido, são, respectivamente: -98°C e 37°C e $18,5^{\circ}\text{C}$ e 189°C

Proponha uma explicação para o fato de o dimetilsulfóxido possuir maiores pontos de fusão e ebulição que o dimetilsulfureto.

Questão 9. Considere os compostos abaixo e os seus respectivos valores de $\text{p}K_{\text{a}}$ em meio aquoso.

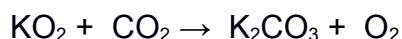


a) Coloque os compostos em ordem crescente de acidez (do menos ácido ao mais ácido).

b) Explique qual é a razão que leva à diferença de acidez entre (i) e (ii).

c) Com qual(is) dos compostos a piridina pode reagir? Por quê? Dado: $\text{p}K_{\text{a}}$ do piridínio = 5,21.

Questão 10. A reação entre o superóxido de potássio (KO_2) e o dióxido de carbono é utilizada em equipamento de respiração por equipes de salvamento como absorvedora de CO_2 e fonte de oxigênio, conforme a equação não-balanceada abaixo. Considerando essa reação, resolva os itens abaixo.



a) Quantos mols de O_2 são produzidos quando 0,300 mol de KO_2 reage segundo a reação acima?

b) Quantos gramas de KO_2 são necessários para formar 6,00 g de O_2 ?