

# **Programa de Pós-Graduação em Química – UNIFAL-MG**

## **PROVA ESCRITA DE CONHECIMENTOS GERAIS**

### **EM QUÍMICA**

#### **Seleção 2019/2**

#### **Orientações Importantes:**

- 1) IDENTIFIQUE TODAS AS FOLHAS DA PROVA COM SEU NÚMERO DE INSCRIÇÃO.
- 2) EM HIPÓTESE ALGUMA USE IDENTIFICAÇÃO COM SEU NOME.
- 3) RESPONDA TODAS AS QUESTÕES A TINTA NA FOLHA REFERENTE À QUESTÃO. SE NECESSÁRIO, UTILIZE O VERSO.
- 4) PARA RASCUNHO, UTILIZE E A FOLHA ESPECIFICADA, NO FINAL DA PROVA. ESTA NÃO SERÁ CONSIDERADA NA CORREÇÃO DA PROVA.
- 5) A DURAÇÃO DA PROVA É DE, NO MÁXIMO, 3 (TRÊS) HORAS.
- 6) O CANDIDATO QUE DEIXAR A SALA DURANTE O PERÍODO DE REALIZAÇÃO DA PROVA NÃO PODERÁ RETORNAR.

# Tabela periódica

1 <b>H</b> hidrogênio 1,008																	2 <b>He</b> hélio 4,0026
3 <b>Li</b> lítio 6,94	4 <b>Be</b> berílio 9,0122											5 <b>B</b> boro 10,81	6 <b>C</b> carbono 12,011	7 <b>N</b> nitrogênio 14,007	8 <b>O</b> oxigênio 15,999	9 <b>F</b> flúor 18,998	10 <b>Ne</b> neônio 20,180
11 <b>Na</b> sódio 22,990	12 <b>Mg</b> magnésio 24,305											13 <b>Al</b> alumínio 26,982	14 <b>Si</b> silício 28,085	15 <b>P</b> fósforo 30,974	16 <b>S</b> enxofre 32,06	17 <b>Cl</b> cloro 35,45	18 <b>Ar</b> argônio 39,948
19 <b>K</b> potássio 39,098	20 <b>Ca</b> cálcio 40,078(4)	21 <b>Sc</b> escândio 44,956	22 <b>Ti</b> titânio 47,867	23 <b>V</b> vanádio 50,942	24 <b>Cr</b> cromio 51,996	25 <b>Mn</b> manganês 54,938	26 <b>Fe</b> ferro 55,845(2)	27 <b>Co</b> cobalto 58,933	28 <b>Ni</b> níquel 58,693	29 <b>Cu</b> cobre 63,546(3)	30 <b>Zn</b> zinco 65,38(2)	31 <b>Ga</b> gálio 69,723	32 <b>Ge</b> germânio 72,630(8)	33 <b>As</b> arsênio 74,922	34 <b>Se</b> selênio 78,971(8)	35 <b>Br</b> bromo 79,904	36 <b>Kr</b> criptônio 83,798(2)
37 <b>Rb</b> rubídio 85,468	38 <b>Sr</b> estrôncio 87,62	39 <b>Y</b> ítrio 88,906	40 <b>Zr</b> zircônio 91,224(2)	41 <b>Nb</b> nióbio 92,906	42 <b>Mo</b> molibdênio 95,95	43 <b>Tc</b> tecnécio [98]	44 <b>Ru</b> rutênio 101,07(2)	45 <b>Rh</b> ródio 102,91	46 <b>Pd</b> paládio 106,42	47 <b>Ag</b> prata 107,87	48 <b>Cd</b> cádmio 112,41	49 <b>In</b> índio 114,82	50 <b>Sn</b> estanho 118,71	51 <b>Sb</b> antimônio 121,76	52 <b>Te</b> telúrio 127,60(3)	53 <b>I</b> iodo 126,90	54 <b>Xe</b> xenônio 131,29
55 <b>Cs</b> césio 132,91	56 <b>Ba</b> bário 137,33	57 a 71	72 <b>Hf</b> hafnio 178,49(2)	73 <b>Ta</b> tântalo 180,95	74 <b>W</b> tungstênio 183,84	75 <b>Re</b> rênio 186,21	76 <b>Os</b> ósmio 190,23(3)	77 <b>Ir</b> irídio 192,22	78 <b>Pt</b> platina 195,08	79 <b>Au</b> ouro 196,97	80 <b>Hg</b> mercúrio 200,59	81 <b>Tl</b> tálio 204,38	82 <b>Pb</b> chumbo 207,2	83 <b>Bi</b> bismuto 208,98	84 <b>Po</b> polônio [209]	85 <b>At</b> astato [210]	86 <b>Rn</b> radônio [222]
87 <b>Fr</b> frâncio [223]	88 <b>Ra</b> rádio [226]	89 a 103	104 <b>Rf</b> rutherfordio [267]	105 <b>Db</b> dúbnio [268]	106 <b>Sg</b> seabórgio [269]	107 <b>Bh</b> bóhrio [270]	108 <b>Hs</b> hássio [269]	109 <b>Mt</b> meitnério [278]	110 <b>Ds</b> darmstádio [281]	111 <b>Rg</b> roentgênio [281]	112 <b>Cn</b> copernício [285]	113 <b>Nh</b> nihônio [286]	114 <b>Fl</b> fleróvio [289]	115 <b>Mc</b> moscóvio [288]	116 <b>Lv</b> livermório [293]	117 <b>Ts</b> tennesso [294]	118 <b>Og</b> oganessônio [294]
			57 <b>La</b> lantânio 138,91	58 <b>Ce</b> cério 140,12	59 <b>Pr</b> praseodímio 140,91	60 <b>Nd</b> neodímio 144,24	61 <b>Pm</b> promécio [145]	62 <b>Sm</b> samário 150,36(2)	63 <b>Eu</b> europio 151,96	64 <b>Gd</b> gadolínio 157,25(3)	65 <b>Tb</b> térbio 158,93	66 <b>Dy</b> disprósio 162,50	67 <b>Ho</b> hólmio 164,93	68 <b>Er</b> érbio 167,26	69 <b>Tm</b> túlio 168,93	70 <b>Yb</b> itérbio 173,05	71 <b>Lu</b> lutécio 174,97
			89 <b>Ac</b> actínio [227]	90 <b>Th</b> tório 232,04	91 <b>Pa</b> protactínio 231,04	92 <b>U</b> urânio 238,03	93 <b>Np</b> neptúnio [237]	94 <b>Pu</b> plutônio [244]	95 <b>Am</b> américio [243]	96 <b>Cm</b> cúrio [247]	97 <b>Bk</b> berquílio [247]	98 <b>Cf</b> califórnio [251]	99 <b>Es</b> einstênio [252]	100 <b>Fm</b> fémio [257]	101 <b>Md</b> mendelévio [259]	102 <b>No</b> nobélio [259]	103 <b>Lr</b> laurêncio [262]





Pró-reitoria de Pesquisa e Pós-graduação  
Programa de Pós-graduação em Química  
Prova escrita de conhecimentos em química  
Seleção 2019/2



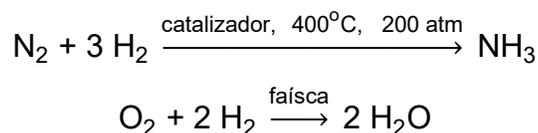
**Número de Inscrição:**

### Questão 1 (1,0 pontos)

- a) (0,5) Necessita-se de energia para remover dois elétrons do Ca para formar  $\text{Ca}^{2+}$  e para adicionar dois elétrons no O para formar  $\text{O}^{2-}$ . Explique por que o CaO é estável em relação aos elementos livres?
- b) (0,5) Explique por que a energia de rede do MgO é maior que a do  $\text{MgCl}_2$ .

### Questão 2 (1,5 ponto)

São dadas as reações e condições de obtenção amônia ( $\text{NH}_3$ ) e da água ( $\text{H}_2\text{O}$ ) a partir da reação dos respectivos gases com  $\text{H}_2$ :



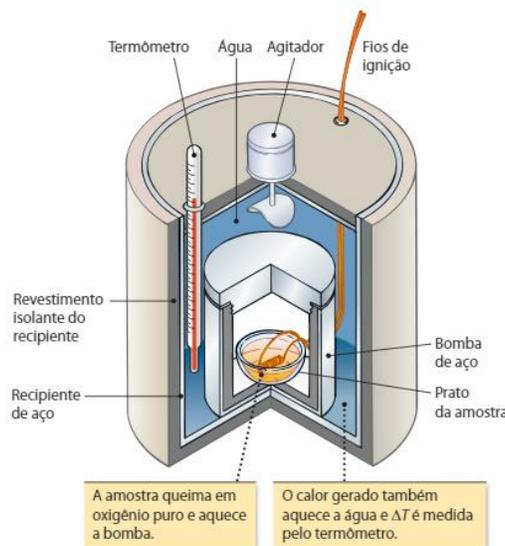
- a) (0,5) Desenhe o diagrama de orbital molecular do  $\text{N}_2$  e do  $\text{O}_2$  e identifique os orbitais HOMO e LUMO (mostre apenas os orbitais atômicos de valência).
- b) (0,5) Calcule a ordem de ligação para o íon  $\text{O}_2^-$ .
- c) (0,5) Considere os diagramas de orbitais moleculares para as moléculas de  $\text{N}_2$  e  $\text{O}_2$ , explique em função dos mesmos as diferenças das condições necessárias para a obtenção de  $\text{NH}_3$  e  $\text{H}_2\text{O}$ .



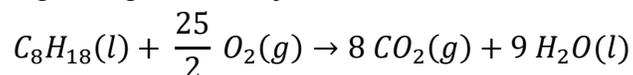
Número de Inscrição:

### Questão 3 (1,0 ponto)

A calorimetria a volume constante é uma técnica termoquímica largamente usada para determinar energia (valor calórico) de diversos materiais e por isso, é corriqueiramente utilizada na indústria de alimentos e de combustível. Um típico calorímetro à volume constante é mostrado na figura ao lado. O processo de análise consiste em colocar uma amostra de massa conhecida de um sólido ou de um líquido combustível no interior da chamada “bomba de aço”, geralmente um cilindro com grossas paredes de aço, e fazê-la queimar sob uma rica atmosfera de oxigênio a partir de uma centelha elétrica (ignição). Ao redor da bomba calorimétrica existe um reservatório de água que é totalmente isolado do meio externo por uma parede contendo revestimento isolante (sistema adiabático). O calor liberado pela reação de combustão aquece então a bomba e a água em torno dela. A bomba, seu conteúdo e a água são definidos como o sistema e sabe-se que toda a energia gerada no processo de queima do material é nele conservada.



Com essas informações considere o processo de queima de uma amostra de 1,00 grama de octano (constituente principal da gasolina) dentro de um calorímetro a volume constante contendo 1,20 kg de água. A reação envolvida é:



Verifica-se que ao longo desse processo a temperatura da água e da bomba calorimétrica aumenta de 25,00 °C para 33,20 °C. Determine a energia de combustão por mol de octano.

(Dados: capacidade calorífica da bomba = 837 J/K, capacidade calorífica específica da água = 4,184 J/g.K, Massa molar do octano = 114,2 g/mol)

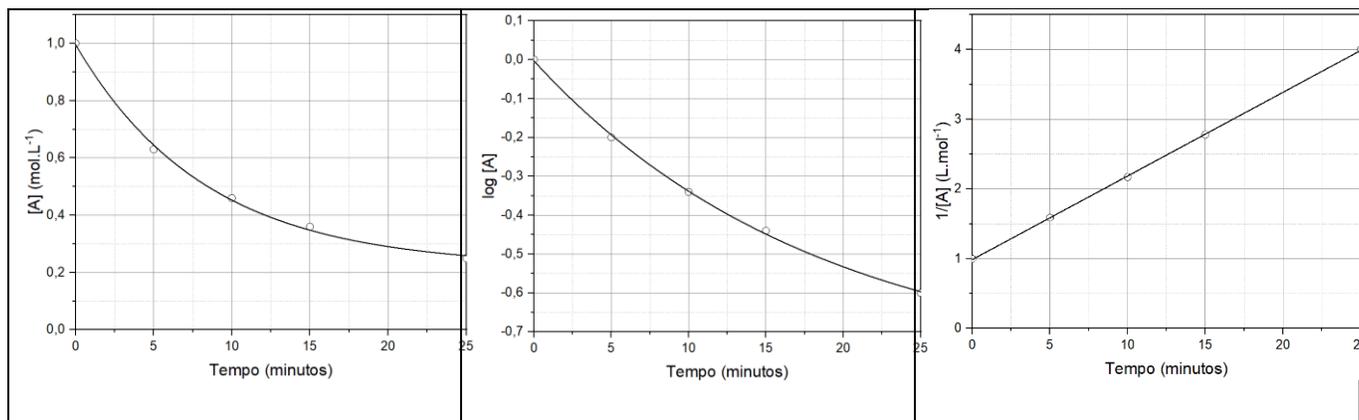


Número de Inscrição:

### Questão 4 (1,5 ponto)

Considere a reação de decomposição dada por:  $A \rightarrow 2B + C$ . Os dados referentes à essa reação são apresentados na tabela abaixo, assim como alguns gráficos relacionados.

Tempo (min)	[A] (mol/L)	Log [A]	1/[A]
0	1,00	0,00	1,00
5	0,63	-0,20	1,59
10	0,46	-0,34	2,17
15	0,36	-0,44	2,78
25	0,25	-0,60	4,00



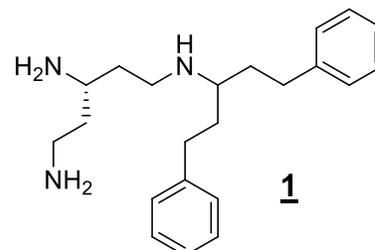
- (0,50) Estabeleça a ordem da reação explicando como chegou à essa conclusão.
- (0,50) Qual é a constante de velocidade k para o processo?
- (0,50) Qual é o tempo de meia vida ( $t_{1/2}$ ), se a concentração inicial  $[A]_0 = 1,00$  mol/L?



Número de Inscrição:

### Questão 5 (1,0 pontos)

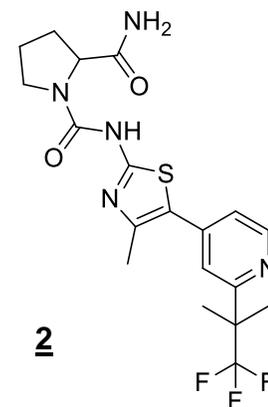
A substância **1** ao lado é um antibiótico 32 vezes mais potente que a claritromicina contra *Escherichia coli in vitro* (Eur. J. Med. Chem., **2019**, 178, 30). Observando a sua estrutura responda:



- (0,3) Esse antibiótico é uma substância possui características ácidas e/ou básicas em solução aquosa? Represente o(s) grupo(s) responsável (responsáveis) por essas características.
- (0,2) Represente a reação de **1** com solução de HCl, 6 mol/L, se houver.
- (0,2) Represente a reação de **1** com solução de NaOH, 6 mol/L, se houver.
- (0,3) Represente o mecanismo da reação de **1** com cloreto de benzila (PhCH<sub>2</sub>Cl).

### Questão 6 (1,5 ponto)

O Alpelisib **2** é um medicamento recentemente aprovado pelo FDA para o tratamento de câncer de mama. Atua seletivamente inibindo a fosfatidilinositol 3-quinase (PI3K), uma lipídio quinase que está envolvida em vários processos biológicos, incluindo a proliferação, a sobrevivência, a diferenciação e o metabolismo celular. Observando a estrutura de **2**, responda às seguintes questões:



- (0,5) Qual o número máximo de estereoisômeros que a substância **2** pode apresentar?
- (1,0) Represente a configuração absoluta de um par de enantiômeros de **2**. Se preferir desenhe somente o carbono quiral com os ligantes para facilitar a sua representação.



Número de Inscrição:

### Questão 7 (1,5 pontos)

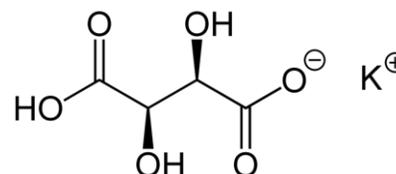
Considere o preparo de uma solução tampão que será utilizada como fase móvel em uma determinação cromatográfica de fase reversa. Suponha que a solução foi preparada através da mistura de 50 mL de ácido acético ( $\text{CH}_3\text{COOH}$ ,  $pK_a=4,75$ ) na concentração de 1,5 M e 70 mL de uma solução de acetato de sódio na concentração de 1,2 M, completando-se com água destilada até o volume final de 300 mL.

- (0,2) Escreva as reações químicas que ocorrem com o ácido acético e com o acetato em meio aquoso, escrevendo a respectiva constante de equilíbrio  $K_a$  do ácido acético.
- (0,5) Qual o pH final desta solução? Qual a concentração molar da solução tampão?
- (0,8) E se no volume de 100 mL desta solução forem adicionados 8,0 mL de ácido clorídrico na concentração de 1,0 M, esta solução conseguirá manter o pH constante? Em caso contrário, qual será o pH final desta solução tampão?

Dados: Fórmula de tampão:  $pH = pK_a + \log\left(\frac{[B]}{[HB]}\right)$

### Questão 8 (1,0 ponto)

O ácido tartárico está presente nas uvas e o seu sal monoácido de potássio (estrutura ao lado), cristaliza-se naturalmente nos processos fermentativos de produção de vinhos. Sabendo que os valores de  $pK_a$  do ácido tartárico são  $pK_{a1} = 2,9$  e  $pK_{a2} = 4,4$ , encontre:



- (0,3) O pH de uma solução preparada pela solubilização completa de 15,7 g de ácido tartárico em 150,0 mL.
- (0,7) Qual a concentração de potássio ( $\text{g.L}^{-1}$ ) da solução anterior?