



Espelho Prova seleção PPGQB 2024.2

Q 01.

O candidato deve relacionar no gráfico a variação de K_w em função da temperatura, e compreender que a condição de neutralidade da água pura, está relacionada a concentrações iguais de $[H_3O^+]$ e $[OH^-]$ no meio, as quais influenciam no valor de pH final. Por exemplo, a $25^\circ C$ o valor de $K_w = 1,0 \times 10^{-14}$, equivale a $pH = 7,0$ para a água pura. Desta forma, em $10^\circ C$ o valor de $K_w < 1,0 \times 10^{-14}$, logo o $pH_{10^\circ C} > 7,0$. De forma análoga, em $40^\circ C$ o $K_w > 1,0 \times 10^{-14}$, portanto, $pH_{40^\circ C} < 7,0$. Portanto, o pH que indica a neutralidade está relacionada ao K_w da água, o qual varia com a temperatura. Logo, para cada valor de temperatura ($10, 25$ ou $40^\circ C$) tem-se um valor de pH.

Q 02.

Os dados fornecidos são:

Molaridade (M) = $0,75 \text{ mol/L}$

Grau de ionização (α) = 8% ou $0,08$

pH = ?

Para determinar o pH, primeiro calcule o valor da concentração de ($[OH^-]$) pela seguinte equação:

$$[OH^-] = M \cdot \alpha$$

$$[OH^-] = 0,75 \cdot 0,08$$

$$[OH^-] = 0,06 \text{ ou } 6 \cdot 10^{-2} \text{ mol/L}$$

Conhecendo $[OH^-]$, basta calcular o pOH na expressão:

$$pOH = -\log [OH^-]$$

$$pOH = -\log 6 \cdot 10^{-2}$$

$$pOH = 2 - \log 6$$

$$pOH = 2 - 0,78$$

$$pOH = 1,22$$

Por fim, para encontrar o valor do pH basta diminuir 14 do valor de pOH, na expressão abaixo:

$$pH + pOH = 14$$

$$pH = 14 - pOH$$

$$pH = 14 - 1,22. \quad \text{----} \rightarrow \text{pH} = 12,78$$

Q 03.

$$n_{Ag^+ \text{ excesso}} = n_{SCN^-} = V_{SCN^-} \times [SCN^-] = 5,20 \text{ mL} \times 0,150 \text{ mol.L}^{-1} = 0,780 \text{ mmol}$$

$$n_{Ag^+ \text{ inicial}} = V_{AgNO_3} \times [AgNO_3] = 50,00 \text{ mL} \times 0,025 \text{ mol.L}^{-1} = 1,25 \text{ mmol}$$



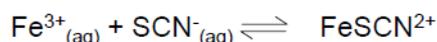
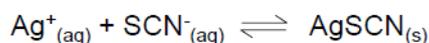
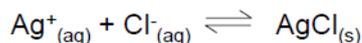
Universidade Federal de Alagoas
Instituto de Química e
Biotecnologia
Programa de Pós-Graduação em Química e
Biotecnologia

Av. Lourival de Melo Mota, s/n, Campus A.C. Simões, Maceió-AL, 57072-900, Brasil.



$n_{Cl^-} = n_{Ag^+ \text{ gasto}} = n_{Ag^+ \text{ inicial}} - n_{Ag^+ \text{ excesso}} = 1,25 \text{ mmol} - 0,780 \text{ mmol} = 0,470 \text{ mmol}$
 $m_{NaCl} = 0,47 \text{ mmol} \times 58,44 \text{ g mol}^{-1} = 27,47 \text{ mg em } 25 \text{ mL de solução inicial}$
em 100,0 ml $m_{NaCl} = 109,9 \text{ mg} = 0,1099 \text{ g}$

Reações



Q 04.

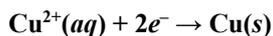
Sabendo que a reação pode ser interpretada em termos de faradays de eletricidade, é preciso, primeiro, calcular quantos faradays atravessam a célula. Sendo $1 \text{ A} = 1 \text{ Cs}^{-1}$, o número total de coulombs será:

$$(5,0 \text{ Cs}^{-1})(60 \text{ s min}^{-1})(60 \text{ min h}^{-1})(1,5 \text{ h}) \text{ ou } 2,7 \times 10^4 \text{ C}$$

Considerando $1 \text{ F} = 9,65 \times 10^4$, teremos:

$$2,7 \times 10^4 \text{ C} \times \frac{1 \text{ F}}{9,65 \times 10^4} = 0,28 \text{ F}$$

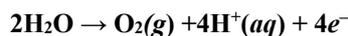
Analisando a reação de eletrodo, sabe-se que no cátodo os íons cúpricos, Cu^{2+} , se reduzem a cobre metálico:



A partir da equação vemos que 1 mol de Cu é produzido a partir de 2 F de eletricidade (2 mols de elétrons) e, assim, o número da massa em gramas de Cu produzido é:

$$0,28 \text{ F} \times \frac{1 \text{ mol de Cu}}{2 \text{ F}} \times \frac{63,5 \text{ g de Cu}}{1 \text{ mol de Cu}} = 8,9 \text{ g de Cu}$$

O oxigênio é formado no ânodo:



A partir da semi-reação sabe-se que para produzir 1 mol de O_2 devem passar através da célula 4 F de eletricidade (quatro mols de elétrons). Assim, a quantidade em gramas de O_2 formado é:

$$0,28 \text{ F} \times \frac{1 \text{ mol de } O_2}{4 \text{ F}} \times \frac{32,0 \text{ g de } O_2}{1 \text{ mol de } O_2} = 2,2 \text{ g de } O_2$$



Universidade Federal de Alagoas
Instituto de Química e
Biociência
Programa de Pós-Graduação em Química e
Biociência



Av. Lourival de Melo Mota, s/n, Campus A.C. Simões, Maceió-AL, 57072-900, Brasil.

Q 05.

a) $\text{pH} = 11,33$
 $\text{pOH} = 14 - 11,33 = 2,67$
 $\text{pOH} = -\log [\text{OH}^-]$
 $[\text{OH}^-] = 10^{-2,67} = 0,002 \text{ mol L}^{-1}$

Avaliando a estequiometria de dissociação da base orgânica verifica-se que no equilíbrio:

$[\text{C}_{10}\text{H}_{15}\text{ONH}^+] = [\text{OH}^-] = x = 0,002 \text{ mol L}^{-1}$
 $[\text{C}_{10}\text{H}_{15}\text{ON}] = 0,035 - x = 0,035 - 0,002 = 0,033 \text{ mol L}^{-1}$

b)
$$K_b = \frac{[\text{C}_{10}\text{H}_{15}\text{ONH}^+][\text{OH}^-]}{[\text{C}_{10}\text{H}_{15}\text{ON}]}$$

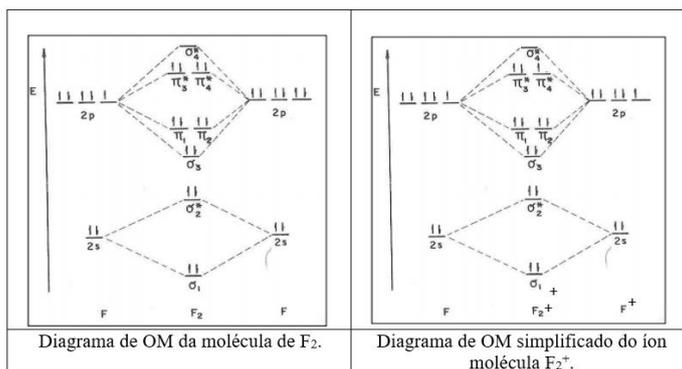
$$K_b = \frac{(0,002)(0,002)}{(0,033)} = 1,2 \times 10^{-4}$$

$\text{pK}_b = -\log K_b$
 $\text{pK}_b = -\log 1,2 \times 10^{-4}$
 $\text{pK}_b = 3,92$

Q 06

Nº quântico principal nos fornece informações sobre a energia do elétron/orbital.
 Nº quântico secundário nos fornece informações sobre a forma do orbital.
 Nº quântico magnético nos fornece informações sobre a orientação do orbital.

Q 07



a) Ordem de ligação para F_2 . $\text{OL} = (\text{n}^\circ \text{ e}^- \text{ em orbitais ligantes} - \text{n}^\circ \text{ e}^- \text{ em orbitais antiligantes})/2 = 1$

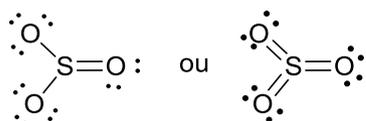
Ordem de ligação para F_2^+ . $\text{OL} = (\text{n}^\circ \text{ e}^- \text{ em orbitais ligantes} - \text{n}^\circ \text{ e}^- \text{ em orbitais antiligantes})/2 = 1,5$

b) Comparativamente, F_2^+ tem energia ligação maior e comprimento de ligação menor em relação à molécula de F_2 , pois há uma diminuição do nº de elétrons em orbitais antiligantes.



Q 08

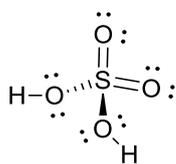
a) trióxido de enxofre nítrico, SO_3 , total de elétrons de valência para a espécie = 24e.



Estruturas com e sem expansão são aceitas.

Hibridização = sp^2 , Geometria da molécula = trigonal plana.

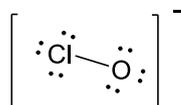
b) ácido sulfúrico, H_2SO_4 , total de elétrons de valência para a espécie = 32e.



Expansão do octeto para o S.

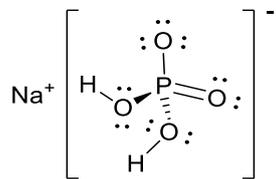
Hibridização = sp^3 . Geometria da molécula = tetraédrica.

c) íon hipoclorito, ClO^- , total de elétrons de valência para a espécie = 14e.



Não cabe comentar a hibridização, pois a espécie é diatômica.

d) di-hidrogenofosfato de sódio ou fosfato monossódico, NaH_2PO_4 , total de elétrons de valência para a espécie = 32e.



Expansão do octeto para o P.

Hibridização = sp^3 . Geometria do íon = tetraédrica.

Q 09



Universidade Federal de Alagoas
Instituto de Química e
Biotecnologia
Programa de Pós-Graduação em Química e
Biotecnologia

Av. Lourival de Melo Mota, s/n, Campus A.C. Simões, Maceió-AL, 57072-900, Brasil.



$$\Delta H^{\circ}f = \Delta H^{\circ}_{\text{sublimação}} + EI + \frac{1}{2} \Delta H^{\circ}_{\text{dissociação}} + \Delta H^{\circ}_{\text{AE}} + \Delta H_{\text{rede}}$$

$$-276,8 = 178,2 + 590,0 + 79,3 - 328,2 + \Delta H_{\text{rede}}$$

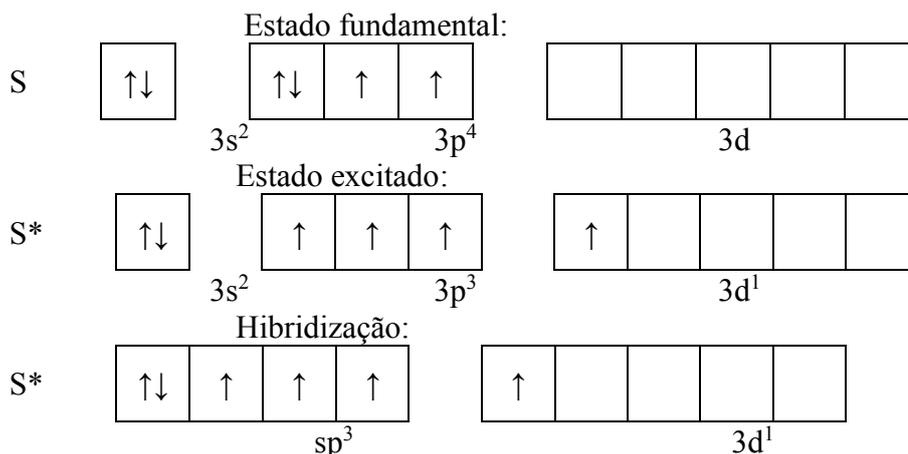
$$-276,8 = 519,3 + \Delta H_{\text{rede}}$$

$$-276,8 = 519,3 + \Delta H_{\text{rede}}$$

$$-276,8 - 519,3 = \Delta H_{\text{rede}}$$

$$\Delta H_{\text{rede}} = -796,1 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Q 10



Geometria molecular: Tetraédrica

O par de elétrons livres se encontra no orbital híbrido sp^3

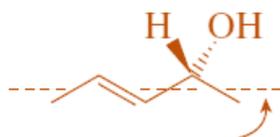
Q 11.

Os compostos são isômeros constitucionais, possuem a mesma composição, mas a conectividade é diferente. O primeiro é o 1-bromo-2-propanol e o segundo é o 2-bromo-1-propanol.

Os compostos possuem mesma composição e mesmas conectividades, logo são estereoisômeros. Verificando a configuração absoluta de cada um pelo sistema de Cahn-Ingold-Prelog, temos que o primeiro composto é o (S)-2-bromobutano e o segundo é o (R)-2-bromobutano. Assim, tratam-se de enantiômeros.

Os compostos possuem mesma composição e mesmas conectividades e são a imagem no espelho uma da outra, no entanto, como são aquiral, são superponíveis e representam a mesma molécula.

As duas estruturas são idênticas, girando a segunda estrutura 180° em torno de um eixo é possível observar que são idênticas, ambas têm configuração E na ligação dupla e R no centro estereogênico.



Q 12.

Q 13

Q14



Q 15

A maior basicidade da piperidina e pirrolidina pode ser explicada pelo efeito doador de elétrons dos grupos alquila, aumentando a densidade eletrônica do nitrogênio e facilitando a captura do próton H^+ .

A menor basicidade da anilina se dá devido ao par de elétrons não compartilhado do nitrogênio estar deslocalizado no sistema π do anel aromático (em ressonância), diminuindo sua disponibilidade em capturar um próton H^+ . No pirrol o par de elétrons faz parte do sistema aromático, não estando assim disponível para captura do próton H^+ .

Para a piridina, o par de elétrons do nitrogênio ocupa um orbital híbrido sp^2 do nitrogênio, e elétrons que ocupam orbitais com maior caráter s são mais fortemente mantidos do que aqueles com menos caráter s, diminuindo assim sua disponibilidade em capturar o próton H^+ .

Q 16

Amido é um carboidrato de reserva energética encontrado em plantas constituído por unidades de glicose, apresentando porção linear (amilose) com ligações glicosídicas do tipo α -1,4, e porção ramificada (amilopectina) com ligações glicosídicas do tipo α -1,4 e, nos pontos de ramificação, α -1,6. Glicogênio é um carboidrato de reserva energética ramificado encontrado em animais constituído por unidades de glicose, apresentando ligações glicosídicas do tipo α -1,4 e, nos pontos de ramificação, α -1,6. Celulose é um carboidrato estrutural, de cadeia linear, encontrado em plantas e constituído por unidades de glicose unidas entre si por ligações glicosídicas do tipo β -1,4. Quitina é um carboidrato estrutural, de cadeia linear, encontrado em animais e constituído por unidades de N-acetil-glicosamina unidas entre si por ligações glicosídicas do tipo β -1,4.



Universidade Federal de Alagoas
Instituto de Química e
Biotecnologia
Programa de Pós-Graduação em Química e
Biotecnologia



Av. Lourival de Melo Mota, s/n, Campus A.C. Simões, Maceió-AL, 57072-900, Brasil.

Q 17

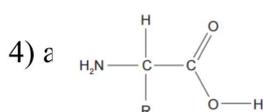
O DNA possui a pentose do tipo desoxirribose; as bases nitrogenadas adenina, timina, citosina e guanina; e, geralmente, a presença de dupla hélice unidas entre si de modo antiparalelo e complementar, através de 2 ligações de hidrogênio entre adenina e timina e 3 ligações de hidrogênio entre citosina e guanina, e interações de empilhamento de bases. O RNA possui a pentose do tipo ribose; as bases nitrogenadas adenina, uracila, citosina e guanina; e a presença de fita simples, apesar de haver RNA fita dupla em alguns organismos. A ribose do RNA, por possuir uma hidroxila no carbono 2, sofre hidrólise em meio alcalino, fenômeno que não ocorre no DNA. A uracila é uma base nitrogenada menos estável do que a timina. As interações de empilhamento de bases, as quais são muito inespecíficas no que diz respeito à identidade das bases empilhadas, determinam a maior contribuição para a estabilidade da dupla-hélice.

Q 18

a) O estudante deve ser capaz de descrever a diminuição da energia de ativação- ΔG^{++} (com menor estado de transição em uma reação catalisada por uma enzima em relação a reação não catalisada). Deve após essa descrição correlacionar a redução da energia de ativação com a energia de ligação- ΔG_B .

b) O estudante deve analisar que, inicialmente, o aumento da temperatura gera aumento na velocidade da reação, pois aumenta a energia cinética das moléculas no sistema. A elevação da temperatura a valores consideravelmente altos resulta em desnaturação da enzima pela alteração das ligações que mantêm sua estrutura tridimensional. O estudante deve informar também que a alteração no pH da solução resulta em mudança nas cargas que as cadeias laterais dos aminoácidos irão apresentar, podendo eliminar uma interação iônica essencial na estabilização da conformação ativa da enzima.

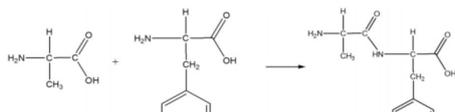
Q 19



Estrutura básica de um aminoácido

b)

a)



Q 20

O candidato deve abordar a forma mais simples, não excluindo outras formas, de promover tal isolamento. A hidrólise alcalina do RNA deve ser descrita como a forma mais simples de isolamento do DNA a partir do complexo DNA/RNA. O mecanismo da hidrólise alcalina do RNA deve



Universidade Federal de Alagoas
Instituto de Química e
Biotecnologia
Programa de Pós-Graduação em Química e
Biotecnologia

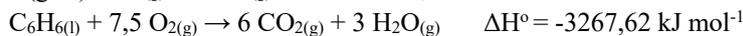
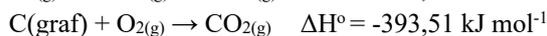
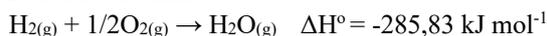
Av. Lourival de Melo Mota, s/n, Campus A.C. Simões, Maceió-AL, 57072-900, Brasil.



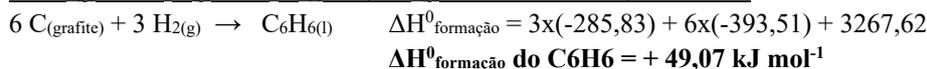
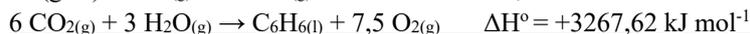
complementar tal questão. Serão consideradas alternativas mais complexas e onerosas como a hidrólise enzimática (RNase) e métodos cromatográficos por afinidade/complementaridade.

Q 21.

Pela Tabela temos:

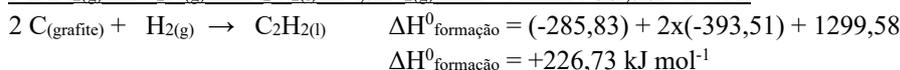
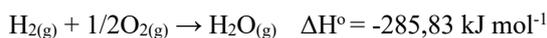


a) Entalpia de formação de benzeno líquido



b) Calcule o ΔH° para a reação $3\text{C}_2\text{H}_2(\text{g}) \rightarrow \text{C}_6\text{H}_6(\text{l})$

Primeiro precisamos calcular a $\Delta H^\circ_{\text{for}}$ do C_2H_2



ΔH° da reação $3\text{C}_2\text{H}_2(\text{g}) \rightarrow \text{C}_6\text{H}_6(\text{l})$

$$\Delta H^\circ_{\text{reação}} = \Delta H^\circ_{\text{form}} \text{ produto} - \Delta H^\circ_{\text{form}} \text{ reagente}$$

$$\Delta H^\circ_{\text{reação}} = \Delta H^\circ_{\text{form}} \text{ C}_6\text{H}_6 - 3 \times (\Delta H^\circ_{\text{form}} \text{ C}_2\text{H}_2)$$

$$\Delta H^\circ_{\text{reação}} = +49,07 - 3 \times 226,73$$

$$\Delta H^\circ_{\text{reação}} = -631,12 \text{ kJ mol}^{-1}$$

Q 22.

$$T = 500\text{K}$$

$$V = 1\text{m}^3 = 1000\text{L}$$

$$T_i = 300\text{K}$$

$$P_i = 100\text{atm}$$

$$m_{\text{N}_2} = 92,4\text{Kg} = 92.400\text{g}$$

$$n = m/MM$$

$$n = 92.400\text{g} / 28,03\text{g/mol}$$

$$n = 3296,47 \text{ mol}$$



Universidade Federal de Alagoas
Instituto de Química e
Biotecnologia
Programa de Pós-Graduação em Química e
Biotecnologia

Av. Lourival de Melo Mota, s/n, Campus A.C. Simões, Maceió-AL, 57072-900, Brasil.



$$P = \frac{nRT}{V - nb} - a\left(\frac{n}{V}\right)^2$$
$$P = \frac{3296,47 \times 0,082 \times 500}{1000 - (3296,47 \times 0,0391)} - 1,4088 \left(\frac{3296,47}{1000}\right)^2$$

P = 139,74 atm

Q 23.

$$T = 25^\circ\text{C} = 298,15\text{K}$$

$$P = 1\text{atm}$$

$$V = 0,125\text{L}$$

$$PV = nRT$$

$$n = \frac{PV}{RT}$$

$$n = \frac{0,125\text{L} \times 1\text{atm}}{0,082 \times 298\text{K}} n = 0,005115\text{mol}$$

0,005115mol de NO equivale a 0,005115 mol de nitrito de isoamila

$$1,0\text{ mol de nitrito de isoamila} \quad - \quad 117,15\text{g}$$

$$0,005115\text{ mol} \quad - \quad X$$

$$X = 0,6033\text{g}$$

$$0,656\text{ g de nitrito de isoamila} - 100\%$$

$$0,6033\text{g} \quad - \quad X$$

$$X = 91,86\%$$

Q 24.

Resp.:

Calor $Q = -50\text{ kJ}$. (Calor deixa o sistema).

$W_{pV} = -20\text{ kJ}$ (Trabalho de expansão)

Por definição, a variação de entalpia de um dado processo é igual a troca de calor feita à pressão constante.

Assim, tem-se que:

$$\Delta H = Q_p$$

$$\Delta H = -50\text{ kJ}$$

Da primeira lei da termodinâmica, assumindo apenas trabalho do tipo pV, tem-se que:

$$\Delta U = Q + W_{pV}$$

Logo,

$$\Delta U = -50\text{ kJ} - 20\text{ kJ}$$

$$\Delta U = -70\text{ kJ}$$

Q 25.

Resp.:

(a) Uma vez que a cinética de decomposição do ciclobutano é de primeira ordem, tem-se que:

$$[C_4H_8]_t = [C_4H_8]_0 e^{-kt}$$



Universidade Federal de Alagoas
Instituto de Química e
Biotecnologia
Programa de Pós-Graduação em Química e
Biotecnologia

Av. Lourival de Melo Mota, s/n, Campus A.C. Simões, Maceió-AL, 57072-900, Brasil.



Aplicando o logaritmo natural de ambos os lados, vem que:

$$\ln \frac{[C_4H_8]_t}{[C_4H_8]_0} = -kt$$

$$\ln \frac{[C_4H_8]_t}{2,00} = -(87s^{-1})(0,010s)$$

$$[C_4H_8]_t = \mathbf{0,83 M}$$

(b) A fração de decomposição após 0,010 s é determinada por:

$$\frac{[C_4H_8]_0 - [C_4H_8]_{0,010}}{[C_4H_8]_0} = \frac{2,00 M - 0,83 M}{2,00 M}$$

$$\frac{[C_4H_8]_0 - [C_4H_8]_{0,010}}{[C_4H_8]_0} = \mathbf{0,58}$$