Universidade de Brasília (UnB)
Instituto de Química (IQ)
Programa de Pós-Graduação em Química
(PPGQ)

Questão 1 - Uma técnica de análise espectroscópica usada em laboratórios de química conhecida como espectroscopia fotoeletrônica no UV (UPS) consiste em irradiar a superfície de um dado material com radiação UV e medir a velocidade com que os elétrons são ejetados. Com estes dados é calculado valor da energia de ionização do material.

(a) Qual o fenômeno envolvido nesta análise.

(b) Escreva a equação usada para calcular a energia de ionização e explicite quais termos já são conhecidos *a priori*, quais são medidos e quais são calculados.

(c) Usando este fenômeno calcule a energia de ionização do Rb, sabendo que quando uma superfície de Rb é irradiada com $\lambda = 58,4nm$, os elétrons são ejetados com velocidade de $2450kms^{-1}$.

Dados: $h = 6,626 \times 10^{-34}Js$, $c = 2,997.10^{8}\ ms^{-1}$, $m_e = 9,11 \times 10^{-31}\ kg$

Universidade de Brasília (UnB)
Instituto de Química (IQ)
Programa de Pós-Graduação em Química
(PPGQ)

Questão 1 - Continuação...

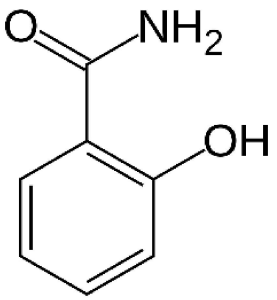
Questão 2 - Considere as espécies NO^+ e NO^-, e demonstrando através da teoria dos orbitais moleculares (TOM), explique a qual das espécies corresponde cada um dos comprimentos de ligação a seguir: 106 pm e 124 pm.

Questão 2 - Continuação...

Questão 3 - Para uma reação química em meio aquoso em que o se necessitava amônia, se utilizou o acetado de amônio como fonte para geração in situ da amina e utilização da mesma em uma reação de adição a uma ligação C=O de um aldeído. A amina gerada é então consumida durante a reação. De acordo com a descrição feita, o que você pode dizer sobre a variação de pH entre o início e o fim da reação?

Questão 3 - Continuação...

Questão 4 - A salicilamida é uma molécula com atividade oral e tópica, e possui ação anti-inflamatória, analgésica e antipirética.



Sabendo que o pKa da salicilamida é 8,2 e que esta molécula, quando neutra, é mais capaz de atravessar membranas biológicas, calcule, utilizando a equação de Hendersson-Hasselbach:

O percentual de moléculas neutras em:

(a) pH 5, o pH aproximado da pele.

(b) pH 2, o pH estomacal.

(c) pH 9.

Questão 4 - Continuação...

Questão 5 - Uma reação obedece a equação a seguir: $A + 2B \rightarrow 2Z$. As taxas de formação de Z sob várias concentrações de A e B são dadas na tabela abaixo.

(a) Determine os valores de α e β.

(b) Determine a constante de taxa *k*, sabendo-se que $v = k[A]^{\alpha}[B]^{\beta}$?

[A]/mol L^{-1}	[B]/mol L^{-1}	y/mol L^{-1} s^{-1}
$3,5 \times 10^{-2}$	$2,3 \times 10^{-2}$	$5,0 \times 10^{-7}$
$7,0 \times 10^{-2}$	$4,6 \times 10^{-2}$	$2,0 \times 10^{-6}$
$7,0 \times 10^{-2}$	$9,2 \times 10^{-2}$	$4,0 \times 10^{-6}$

Questão 5 - Continuação...

Questão 6 - Considerando os seguintes dados de entalpia padrão de reação,

$$SrO(s)+CO_2(g) \rightarrow SrCO_3(s) \qquad \Delta_r H^o(1)=-234\,kJ\,mol^{-1}$$

$$2\,SrO(s) \rightarrow 2\,Sr(s)+O_2(g) \qquad \Delta_r H^o(2)=1184\,kJ\,mol^{-1}$$

$$2\,SrCO_3(s) \rightarrow 2\,Sr(s)+2C(s)+3O_2(g) \qquad \Delta_r H^o(3)=2440\,kJ\,mol^{-1}$$

Calcule o valor de $\Delta_r H$ para a seguinte reação:

$$C(s)+O_2(g) \rightarrow CO_2(g)$$

Questão 6 - Continuação...

Questão 7 - Para a reação $\frac{1}{2}N_2O_4(g) \underset{k_2}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} NO_2(g)$, em equilíbrio, considere os dados da Tabela 7.1 e responda:

(a) Qual a constante de equilíbrio?

(b) Assumindo que a pressão parcial do NO2, no equilíbrio a 25 □C, é igual a 1,8 bar, qual é a pressão parcial do gás N_2O_4?

(c) Qual a espécie química favorecida no equilíbrio? Justifique sua resposta.

Tabela 7.1. Energia livre de Gibbs de formação a 25 °C.

Espécie	**$\Delta G_f°$ (kcal mol^{-1})**
NO_2 (g)	12,3
N_2O_4 (g)	23,4

Dado: R = 1,987 cal mol^{-1} K^{-1}

Questão 7 - Continuação...

Questão 8 – Considere a célula eletroquímica abaixo e responda:

$Pt \mid Fe^{3+}(2{,}0x10^{-2}\ M), Fe^{2+}(6{,}0x10^{-5}\ M) \mid\mid Sn^{2+}(3{,}50x10^{-2}\ M), Sn^{4+}(1{,}50x10^{-4}\ M) \mid Pt$

(a) Calcule o potencial da célula.

(b) Esta reação química é espontânea? Justifique.

Dados:

$E^0_{Fe3+/Fe2+} = +0{,}771V$

$E^0_{Sn4+/Sn2+} = +0{,}154V$

Questão 8 - Continuação...