

Código do Candidato:



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
INSTITUTO DE QUÍMICA



PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

Exame de Seleção para o Doutorado em Química-2013.1

PROVA DE QUÍMICA

INSTRUÇÕES:

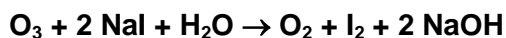
- Confira o caderno de prova, que consta de 08 questões.
- Cole a etiqueta do CÓDIGO do CANDIDATO na capa da prova no campo apropriado. Esta prova é despersonalizada, não sendo permitido colocar nenhum outro elemento de identificação nas folhas de questões, tais como nome, apelido, figuras, nem qualquer outro sinal gráfico que não esteja relacionado com a resolução da questão. **A violação desta instrução implicará em conceito zero nesta prova.**
- Escreva o CÓDIGO do CANDIDATO em todas as folhas no local indicado.
- Não destaque as folhas do caderno de prova. Cada questão deverá ser respondida apenas na respectiva folha utilizando frente e/ou verso.
- Não serão aceitas folhas adicionais.
- Use **apenas** caneta azul ou preta.
- Não serão permitidas consultas a livros, tabelas ou planilhas além dos dados fornecidos na prova.
- O uso de calculadora é permitido.
- A prova terá duração máxima de 02 horas.

Salvador, 19 de março de 2013.

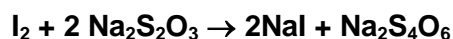
COLE AQUI SUA ETIQUETA
DE IDENTIFICAÇÃO

Código do Candidato:

(**Questão 01**) O ozônio, O_3 , é uma espécie importante na cadeia das reações que conduzem à produção do *smog* fotoquímico. Em uma determinação de ozônio, $2,0 \times 10^4$ L de ar, nas CNTP, foram passados através de uma solução de NaI, onde O_3 , sofre a reação:



O I_2 formado foi determinado com uma solução de $Na_2S_2O_3$ $0,010 \text{ mol L}^{-1}$, segundo a reação:



Sendo necessário 0,042 mL da solução de $Na_2S_2O_3$ para reagir completamente com todo o I_2 . **Calcule a concentração** de O_3 , em $\mu\text{g L}^{-1}$, na amostra de ar. (Dados: O = 16 g mol^{-1} , I = 126,9 g mol^{-1} ; Na = 23 g mol^{-1} ; S = 32 g mol^{-1})

Código do Candidato:

(**Questão 02**) Um frasco contém 500 mL de uma solução de HF $0,015 \text{ mol L}^{-1}$. Adicionou-se 200 mL de água deionizada. **Calcule o pH antes e depois da diluição** ($K_a = 6,70 \times 10^{-4}$).

Código do Candidato:

(**Questão 03**) O quadro abaixo apresenta diversas etapas da cadeia de transporte de elétrons e os potenciais de redução (E_{red}), dos transportadores envolvidos.

Etapa	Reação	E_{red} (V)
1	Ubiquinona + 2 H ⁺ + 2 e ⁻ → ubiquinol	0,045
2	Citocromo a (Fe ³⁺) + e ⁻ → citocromo a (Fe ²⁺)	0,290
3	Citocromo a ₁ (Fe ³⁺) + e ⁻ → citocromo a ₁ (Fe ²⁺)	0,550
4	Citocromo b (Fe ³⁺) + e ⁻ → citocromo b (Fe ²⁺)	0,077
5	Citocromo c (Fe ³⁺) + e ⁻ → citocromo c (Fe ²⁺)	0,254
6	Citocromo c ₁ (Fe ³⁺) + e ⁻ → citocromo c ₁ (Fe ²⁺)	0,220
7	$\frac{1}{2}$ O ₂ + 2 H ⁺ + 2 e ⁻ → H ₂ O	0,816

- a) Considerando que o oxigênio fosse reduzido por apenas um agente redutor, **qual** dentre os citados na quadro acima seria mais eficiente? **Justifique** sua resposta calculando o valor de ΔG para o processo. (Dado: $\Delta G = -nF\Delta E$ e $F = 96500 \text{ J V}^{-1} \text{ mol}^{-1}$)
- b) O citocromo c conseguiria oxidar o citocromo a₁? **Justifique** sua resposta.
- c) **Indique** o citocromo mais estável na forma reduzida.

Código do Candidato:

(Questão 04) Os íons metálicos, como Na^+ (aq) e K^+ (aq), encontram-se ligados às moléculas de água no nosso organismo. A mobilidade iônica dos íons metálicos no organismo interfere em diferentes processos biológicos, como na bomba de sódio e potássio. **Justifique** o aumento nos valores de mobilidade iônica do Li^+ ao K^+ , listados na Tabela abaixo.

Íons	Raio Iônico (angstrom)	Mobilidade iônica
Li^+	78	0,52
Na^+	98	0,68
K^+	133	1,00

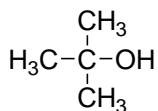
Código do Candidato:

(**Questão 05**) Qual(is) das substâncias a seguir é(são) ácida(s) suficiente para reagir completamente com NaOH ? (pK_a da água é 15,74).

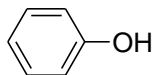
a) *t*-Butanol ($pK_a = 18,0$); fenol ($pK_a = 9,9$); ácido propanóico ($pK_a = 4,86$).

Justifique sua resposta.

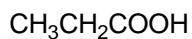
b) Escolha uma reação que ocorre no item (a) e **escreva o equilíbrio químico** envolvido, **nomeando** corretamente as espécies em cada uma das semi-reações.



t-Butanol



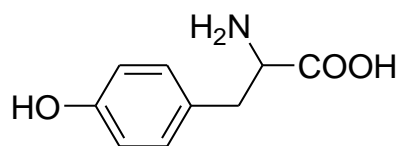
Fenol



Ácido propanóico

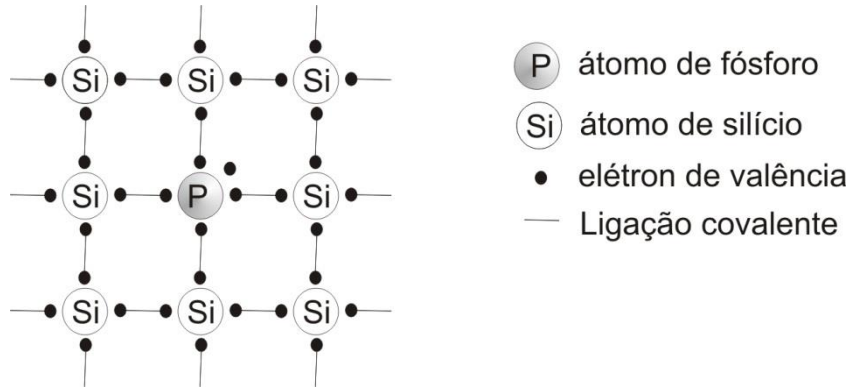
Código do Candidato:

(Questão 06) **Identifique** os grupos funcionais presentes na molécula abaixo, e **desenhe a estrutura** tridimensional do enantiômero de configuração *R*.



Código do Candidato:

(**Questão 07**) Em um cristal de sílica, uma pequena fração de átomos são substituídos por átomos de fósforo, sendo observado um aumento substancial na condutividade elétrica do material (ver modelo simplificado abaixo). **Explique** essa observação.



Código do Candidato:

(Questão 08) As expressões $\Delta S_{\text{universo}} > 0$ e $\Delta G < 0$ podem ser utilizadas como critérios para estabelecer a espontaneidade das reações químicas. **Faça uma dedução da relação** entre essas duas expressões e apresente a **aplicabilidade de cada critério**.