PROCESSO DE SELEÇÃO PARA O PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO
FÍSICA E QUÍMICA DE MATERIAIS
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO JOÃO DEL REI

1º SEMESTRE DE 2023

GABARITO PROVA DE QUÍMICA

Questão 1:

(a) De que modo um sólido **amorfo** difere de um **cristalino**?

Em sólido cristalino, as partículas componentes estão arranjadas em padrão repetitivo ordenado. Em um sólido amorfo, não existe estrutura ordenada.

(b) A sílica amorfa tem densidade de aproximadamente 2,2 g/cm^3, ao passo que a densidade do quartzo cristalino é 2,65 g/cm^3. Esclareça essa diferença de densidades.

Na sílica amorfa, a estrutura regular do quartzo é desfeita, o que leva a existência de menos grupos SiO_2 por volume no sólido amorfo. Assim, o empacotamento será menos eficiente, o que diminui a densidade da sílica amorfa em comparação ao quartzo cristalino.

Questão 2:

Com relação à **Teoria Atômica Moderna**:

(a) Qual fóton é **mais energético**? Aquele com **frequência** de 5,6 x 10^{14} s^{-1} (hertz) ou aquele com **comprimento de onda** de 680 nm (nanômetros)? Justifique sua resposta através de cálculos pertinentes.

Dados: h = 6,626 x 10^{-34} J.s c = 3,0 x 10^{8} m.s^{-1} m_p = 1,67 x 10^{-27} kg J = kg.m^2.s^{-2} *1 mol* = 6,02 x 10^{23}

E = hν **Fóton 1**: E = 6,63 x 10^{-34} J.s x 5,6 x 10^{14} s^{-1} **E = 3,71 x 10^{-19}J**

Fóton 2: 680nm = 6,8 x 10^{-7}m

$$\lambda\nu = c \qquad \nu = \frac{c}{\lambda} \qquad \nu = \frac{3,0x10^{8}\,m.s^{-1}}{6,8x10^{-7}\,m}$$

$$\nu = 4,41x10^{14}\,s^{-1}$$

E = hν E = 6,63 x 10^{-34} J.s x 4,41 x 10^{14} s^{-1} **E = 2,92 x 10^{-19}J**

O fóton mais energético é o fóton 2, ou seja, aquele que possui λ = 680nm

(b) Uma energia de 2,65 x 10^{5} J/mol (Joule/mol) é necessária para fazer com que **um mol** de potássio (K), em uma superfície metálica, perca elétrons por meio do ***efeito fotoelétrico***. Calcule o **comprimento de onda** mais longo da radiação capaz de ionizar **um único átomo de potássio** nesta superfície metálica.

1 mol de K ------ 6,02 x 10^{23} átomos de K ----- 2,65 x 10^{5} J
1 átomo de K ----- X X = 4,4 x 10^{-19} J/átomo de K

$$E = h\nu \longrightarrow \nu = \frac{E}{h} \longrightarrow \nu = \frac{4,4x10^{-19}\,J}{6,33x10^{-34}\,J.s} = 6,95x10^{14}\,s^{-1}$$

$$\nu\lambda = c \longrightarrow \lambda = \frac{c}{\nu} \longrightarrow \lambda = \frac{3,0x10^{8}\,m.s^{-1}}{6,95x10^{14}\,s^{-1}} = 4,31x10^{-7}\,m$$

(c) Calcule **comprimento de onda** de um **próton** que "viaja" à uma velocidade de 3,0 x 10^{6} km/h. Em que região do espectro eletromagnético esse comprimento de onda se encontra?

$m_{próton} = 1,67 \times 10^{-27}$ kg

$v = 3,0 \times 10^{6}$ km/h $= 8,33 \times 10^{5}$ m/s

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

$$\lambda = \frac{6,63x10^{-34}\,kg.m^2s^{-1}}{1,67x10^{-27}\,kg\ x\ 8,33x10^5\,m.s^{-1}}$$

$$\boxed{\lambda = 4,76x10^{-13}\,m}$$

Esse comprimento de onda encontra-se na região dos raios gama.

Questão 3:

Com base nos conceitos de **ligações químicas** e **geometria molecular**, responda as seguintes questões:

AlP (fosfeto de alumínio)
SCl_6 (hexacloreto de enxofre)
$ZnCl_2$ (cloreto de zinco)
CS_2 (sulfeto de carbono)
XeF_4 (tetrafluoreto de xenônio)
B_2O_3 (óxido de boro)

(a) Quais dessas substâncias acima são formadas por **ligações iônicas** e quais por **ligações covalentes**?

AlP, $ZnCl_2$, B_2O_3 → ligações iônicas
SCl_6, CS_2 e XeF_4 → ligações covalentes

(b) Para os **compostos iônicos** coloque-os em **ordem crescente** de **energia de rede**. Explique em detalhes a ordem escolhida.

$ZnCl_2$ < B_2O_3 < AlP

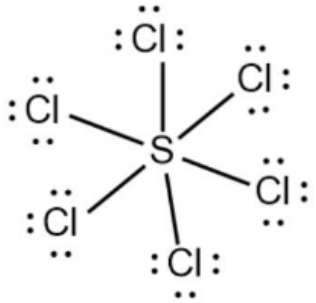
A energia de rede é uma medida da quantidade de energia necessária para estabilização que se obtém quando íons de cargas opostas são agrupados em um sólido iônico. De acordo com sua definição ela depende aproximadamente do produto de cargas em módulo [cátion x ânion] e da distância *r* entre eles.

$$E_{rede} \cong \frac{|Q_1Q_2|}{r}$$

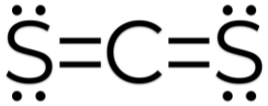
Nesse caso, o produto de cargas do $ZnCl_2$ será: $Zn^{+2}\ Cl_2^{-1} = 2 \times 1 =$ **2**
o produto de cargas do B_2O_3 será: $B^{3+}\ O^{2-} = 3 \times 2 =$ **6**
o produto de cargas do AlP será: $Al^{+3}\ P^{3-} = 3 \times 3 =$ **9**

Quanto maior o produto de cargas, maior a energia de rede, portanto: **$ZnCl_2$ < B_2O_3 < AlP**

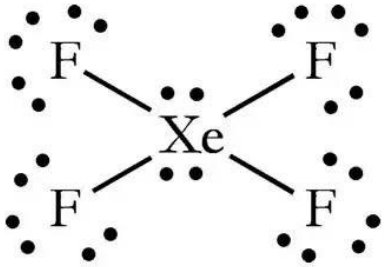
(c) Represente a **estrutura de Lewis** de cada **substância covalente**, preveja a **geometria molecular** e a **hibridização do átomo central**.



Geometria: Octaédrica (6 domínios ligantes)
Hibridização do átomo central: sp^3d^2



Geometria: linear (2 domínios ligantes)
Hibridização do átomo central: sp



Geometria: quadrática plana
(4 domínios ligantes + 2 domínios não-ligantes)
Hibridização do átomo central: sp^3d^2

Questão 4:

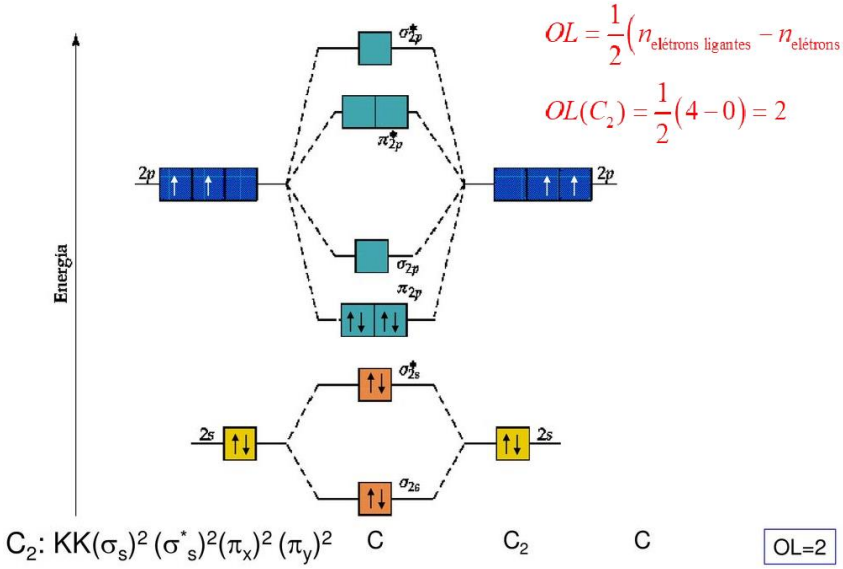
Com base na **<u>Teoria do Orbital Molecular (TOM)</u>**, responda a seguintes questões:

(a) Represente os **<u>diagramas de energia dos orbitais moleculares</u>** e calcule a **<u>ordem de ligação</u>** para as moléculas de C_2 e N_2.

Diagrama de Orbitais Moleculares para a Molécula C_2

$$OL = \frac{1}{2}\left(n_{\text{elétrons ligantes}} - n_{\text{elétrons antiligantes}}\right)$$

$$OL(C_2) = \frac{1}{2}(4-0) = 2$$



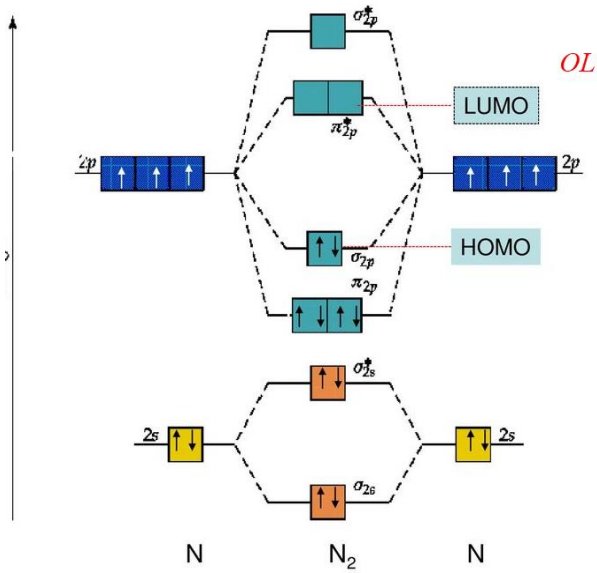
C_2: $KK(\sigma_s)^2(\sigma^*_s)^2(\pi_x)^2(\pi_y)^2$

Diagrama de Orbitais Moleculares Para a Molécula N_2

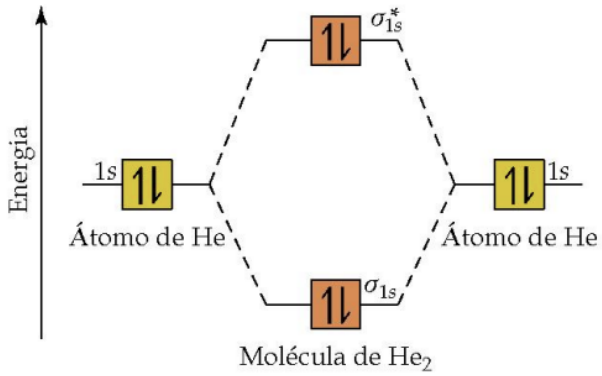
N_2: $KK(\sigma_s)^2(\sigma^*_s)^2(\pi_x)^2(\pi_y)^2(\sigma_z)^2$

$$OL = \frac{1}{2}\left(n_{\text{elétrons ligantes}} - n_{\text{elétrons antiligantes}}\right)$$

$$OL(N_2) = \frac{1}{2}(6-0) = 3$$



(b) Por que a molécula de He_2 não existe? Explique em detalhes tendo como base o **<u>diagrama de energia dos orbitais moleculares</u>** e a **<u>ordem de ligação</u>**.



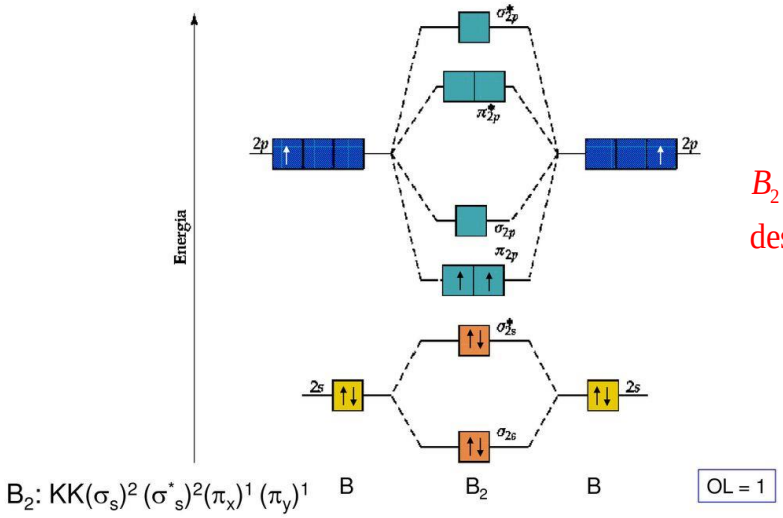
$$OL = \frac{1}{2}\left(n_{\text{elétrons ligantes}} - n_{\text{elétrons antiligantes}}\right)$$

$$OL(He_2) = \frac{1}{2}(2-2) = 0$$

Moléculas com OL = 0 não existem, são consideradas apenas hipotéticas.

(c) Dentre as moléculas de B_2 e F_2, qual delas é **<u>diamagnética</u>** e qual é **<u>paramagnética</u>**? Explique em detalhes.

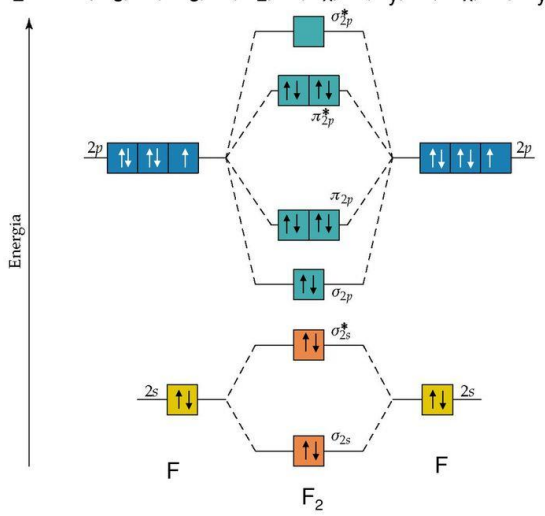
Diagrama de Orbitais Moleculares Para a Molécula B_2



B_2 é paramagnética, pois apresenta elétrons desemparelhados no orbital π_{2p}.

Diagrama de Orbitais Moleculares para a Molécula de Flúor

F_2 $\quad$ F_2: KK$(\sigma_s)^2 (\sigma^*_s)^2 (\sigma_z)^2 (\pi_x)^2 (\pi_y)^2 (\pi^*_x)^2 (\pi^*_y)^2$



F_2 é diamagnética, pois apresenta todos os elétrons emparelhados.

Questão 5:

(a) Uma **<u>solução estoque</u>** de ácido sulfuroso (H_2SO_3) cuja densidade é de 1,03 g/mL, contém 10,0 mols deste ácido. Essa solução estoque foi diluída para uma concentração de 0,65 mol/L em um volume de 1,5 L. Calcule a **<u>molaridade</u>** da solução estoque original.

$$n_{H_2SO_3} = \frac{m_{H_2SO_3}}{MM_{H_2SO_3}} \qquad m_{H_2SO_3} = n_{H_2SO_3} x\ MM_{H_2SO_3}$$

$$m_{H_2SO_3} = 10,0 mol\ x 82,07 g/mol = 820,7 g$$

$$d = \frac{m}{V} \qquad V = \frac{m}{d} \qquad V_{H_2SO_3} = \frac{820,7 g}{1,03 g/mL} = 796,8 mL$$

$M_{\text{solução estoque}}$ = ?
$V_{\text{solução estoque}}$ = 796,8 mL ≅ 0,8 L
$M_{\text{solução diluída}}$ = 0,65 mol/L
$V_{\text{solução diluída}}$ = 1,5 L

$$M_1 V_1 = M_2 V_2$$

$$M_1\ x\ 0,8L = 0,65 mol/L\ x\ 1,5L$$

$$M_1 = 1,22\ mol/L$$

(b) Em uma típica **<u>titulação ácido-base</u>** tem-se ácido sulfúrico (H_2SO_4) e hidróxido de potássio (KOH). Que **<u>volume</u>** de H_2SO_4, cuja concentração molar é 0,11 mol/L, é necessário para reagir completamente com 2,5g de KOH?

$$H_2SO_4 + 2\ KOH \rightarrow K_2SO_4 + 2\ H_2O$$

$M_{H_2SO_4}$ = 0,11 mol.L^{-1}

m_{KOH} = 2,5g

$V_{H_2SO_4}$ = ?

$$M = \frac{n}{V}$$

$$n_{KOH} = \frac{m_{KOH}}{MM_{KOH}} = \frac{2,5g}{56,1 g.mol^{-1}} = 0,04456 mol$$

$$H_2SO_4 + 2\ KOH \rightarrow K_2SO_4 + 2\ H_2O$$

Fator estequiométrico da reação:

1 mol H_2SO_4 ---------- 2 mols KOH
X ---------- 0,04456 mol KOH

X = 0,0223 mol de H_2SO_4

$$M_{H_2SO_4} = \frac{n_{H_2SO_4}}{V_{H_2SO_4}}$$

$$V_{H_2SO_4} = \frac{n_{H_2SO_4}}{M_{H_2SO_4}}$$

$$V_{H_2SO_4} = \frac{0,0223mol}{0,11mol.L^{-1}} = 0,2025L$$