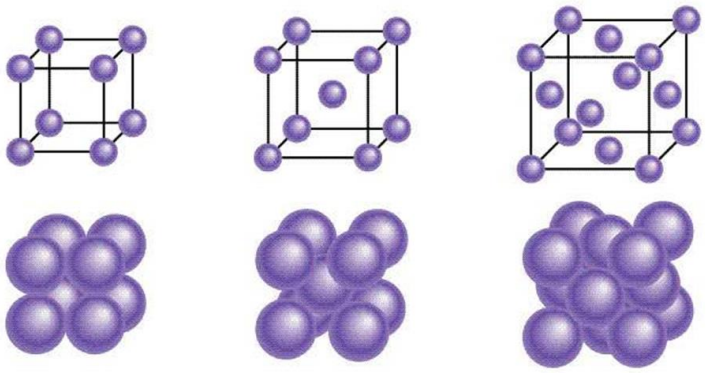
PROCESSO DE SELEÇÃO PARA O PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO
FÍSICA E QUÍMICA DE MATERIAIS
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO JOÃO DEL REI

2º SEMESTRE DE 2023

GABARITO PROVA DE QUÍMICA

Questão 1: (Valor 20,0 pontos)

Sólidos (retículos tridimensionais) são construídos por meio do agrupamento de celas unitárias, semelhantemente a blocos de construção. O reticulo cristalino é definido por estas celas unitárias. Na natureza os retículos cristalinos podem ser construídos utilizando sete tipos de celas unitárias. O mais simples dos sete retículos cristalino é a cela unitária cúbica. Esta classe é composta por três simetrias de cela (cúbica simples, cúbica de corpo centrado e cúbica de face centrada) como mostrado na figura a seguir.



Tendo em vista a organização dos átomos em cada tipo de cela, demonstre quantos átomos cada cela possui.

Cúbica simples: (8 vértices de um cubo) x (1/8 de cada átomo do vértice dentro da cela unitária) = 1átomo por cela.

Cúbica de corpo centrado: [(8 vértices de um cubo) x (1/8 de cada átomo do vértice dentro da cela unitária)] + 1 corpo centrado = 2 átomos

Cúbica de face centrada: [(8 vértices de um cubo) x (1/8 de cada átomo do vértice dentro da cela unitária)] + [(6 faces de um cubo) x (1/2 de cada átomo da face)] = 1 + 3 = 4 átomos.

Questão 2: (Valor 20,0 pontos)

Determine o comprimento de onda de um fóton sabendo que a energia de um mol deste mesmo fóton é igual a 2,396 kJ.

2396 J ——— $6{,}02 \times 10^{23}$ fótons

x ——— 1 fóton

Energia de um fóton é igual a $3{,}98 \times 10^{-21}$ J

$E = h.\nu$

$$\nu = \frac{E}{h} = \frac{3{,}98 \times 10^{-21}\ J}{6{,}62 \times 10^{-34}\ J.s} = 6{,}01 \times 10^{12}\ s^{-1}$$

$c = \nu . \lambda$

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3{,}0 \times 10^{8}\ m\ s^{-1}}{6{,}01 \times 10^{12}\ s^{-1}} = 4{,}99 \times 10^{-5}\ m$$

Questão 3:

A acetona (propanona) é um composto de fórmula molecular C_3H_6O com massa molar igual a 58,08 g mol^{-1} e entra em ebulição a 56 ºC. Já a água (H_2O) que possui massa molar igual a 18 g mol^{-1} entra em ebulição a 100 ºC. Em relação a estes dois compostos responda:

a) **(Valor 10,0 pontos)** Por que apesar da massa molar da água ser por volta de três vezes inferior à massa da acetona seu ponto de ebulição é quase duas vezes o ponto de ebulição da acetona.
b) **(Valor 10,0 pontos)** Explique por que a acetona apesar de ser utilizada como solvente para muitos materiais apolares é muito solúvel em água.

a) Quando no estado líquido uma molécula de água pode fazer pelo menos três ligações de hidrogênio com outras moléculas de água. Desta forma há a necessidade de uma maior quantidade de energia para romper estas interações e fazer com que a uma molécula se desprenda das demais e passe para o estado gasoso. Já uma molécula de acetona não pode fazer ligação de hidrogênio com outras moléculas. Sendo assim as interações que mantem uma molécula próxima a outras são principalmente interações do tipo dipolo-dipolo, que são mais fracas que as ligações de hidrogênio.
b) As moléculas de acetona são solúveis em água pois apesar de não formarem ligações de hidrogênio entre as mesmas moléculas, podem formar ligações de hidrogênio com moléculas de água. O que garante sua solubilidade em água.

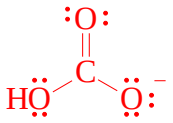
Questão 4:

A estrutura do íon bicarbonato (hidrogenocarbonato) HCO_3^- é mais bem descrita como um híbrido de várias formas de ressonância.

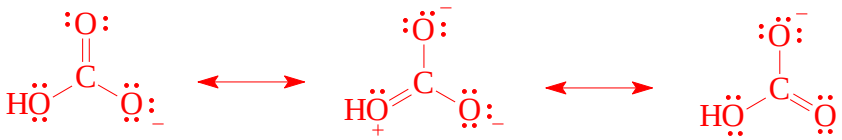
a) **(Valor 10,0 pontos)** Represente sua estrutura de Lewis e suas formas de ressonância;

b) **(Valor 10,0 pontos)** Determine as cargas formais dos átomos em cada estrutura de ressonância e indique quais as formas de ressonâncias contribuem mais para sua verdadeira estrutura. Explique sua resposta.

a)

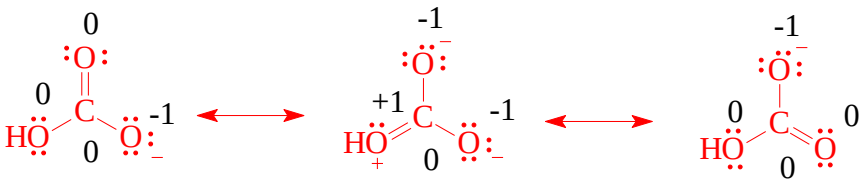


Estrutura de Lewis



Estruturas de ressonância

b)



Estruturas de ressonância com as cargas formais

A primeira e a última estrutura são as que mais contribuem para o híbrido de ressonância, pois em ambas apenas um átomo de oxigênio apresenta carga formal igual a -1, elas são ditas estruturas equivalentes.

Questão 5: (Valor 20,0 pontos)
Determine a massa de NaOH necessária para preparar 150 mL de uma solução de pH igual a 10.

1º determinar a concentração de OH-

pH = 10 pOH = -log[OH-]

pH + pOH = 14 Log [OH] = -4

pOH = 4 $[OH^-] = 10^{-4}$

$[OH^-] = 0{,}0001 \text{ mol } L^{-1}$

2º determinar o número de mols de OH-

$C = \frac{n}{v}$ $0{,}0001 \text{ mol } L^{-1} = \frac{n}{0{,}15 \text{ L}} = 1{,}5 \times 10^{-5} \text{ mol}$

3º determinar a massa de NaOH

1 mol de NaOH —— 40 g

1,5 x 10-5 mol de NaOH —— x → $\boxed{6 \times 10^{-4} \text{ g de NaOH}}$

Dados:

$E = h\,\nu$

$c = \nu \cdot \lambda$

$h = 6{,}62 \times 10^{-34}$ J . S

$c = 3{,}0 \times 10^{8}$ m . s^{-1}

Massas molares:
Na = 23 g mol^{-1}
O = 16 g mol^{-1}
H = 1 g mol^{-1}