



CPF/PASSAPORTE: \_\_\_\_\_

1

**PROCESSO DE SELEÇÃO E ADMISSÃO AO CURSO DE  
MESTRADO EM QUÍMICA APLICADA  
PARA O SEMESTRE 2017/02  
EDITAL PPGQ Nº 002/2017**

**Prova de Físico-Química**

**Instruções:**

- 1) O candidato deverá identificar-se apenas com o número de seu CPF (brasileiros/estrangeiros) ou passaporte (estrangeiros) no local indicado do caderno de questões, bem como nas folhas pautadas. Não poderá haver qualquer outra identificação do candidato, sob pena de sua desclassificação.
- 2) O candidato deverá escolher duas questões para serem respondidas. As respostas devem estar exclusivamente nas folhas pautadas, escritas com caneta esferográfica preta ou azul, sob pena de não serem corrigidas.
- 3) É permitido o uso de calculadora científica não gráfica.
- 4) Todas as questões terão o mesmo valor. Em caso de anulação de alguma questão, a pontuação correspondente será distribuída igualmente entre as demais questões.
- 5) O candidato poderá destacar e levar consigo a última folha do caderno de questões, denominada rascunho. Não é permitida a remoção de qualquer outra folha do caderno de questões sob pena de desclassificação.
- 6) O período de realização das provas é de 4 horas. O candidato deverá devolver o caderno de questões ao término da prova.

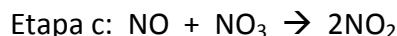
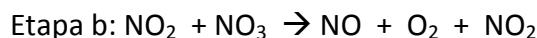
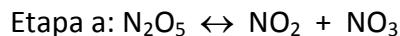


CPF/PASSAPORTE: \_\_\_\_\_

2

### QUÍMICA FÍSICO-QUÍMICA

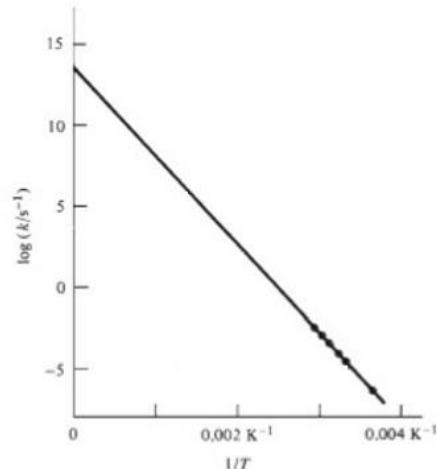
**Questão 1.** A reação química global  $2\text{N}_2\text{O}_5 \rightarrow 4\text{NO}_2 + \text{O}_2$  ocorre seguindo o seguinte mecanismo:



Responda corretamente:

- Em relação ao mecanismo proposto, indique quais são as espécies intermediárias;
- A partir das reações químicas apresentadas no mecanismo proposto, demonstre como chegar à equação química global;
- Descreva as expressões de velocidade de cada etapa do mecanismo;
- Quais os números estequiométricos para cada etapa do mecanismo?
- Indique a molecularidade de cada etapa do mecanismo;
- A dependência da constante de velocidade ( $k$ ) em função da temperatura para a reação  $2\text{N}_2\text{O}_5 \rightarrow 4\text{NO}_2 + \text{O}_2$  foi determinada gerando um gráfico linear ( $\log k$  vs.  $T^{-1}$ ), representado a seguir. A equação da reta que melhor descreve os dados experimentais tem a seguinte expressão:  $\log k = 13,5 - 5500 T^{-1}$ .

Com base nestas informações, determine o valor da energia de ativação de Arrhenius ( $E_a$ ) e o valor do fator pré-exponencial,  $A$ , com as respectivas unidades.



Fonte: LEVINE, I.N Físico-Química. Rio de Janeiro, RJ: LTC, 2012. vol 2.

**CPF/PASSAPORTE:** \_\_\_\_\_

3

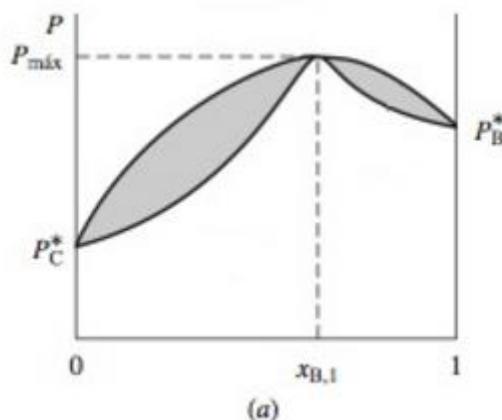
**Questão 2. A)** Calcule a variação de energia livre padrão,  $\Delta_rG^\circ$  para a reação a seguir a 298K. A reação é espontânea no equilíbrio? Justifique considerando a contribuição da entropia e da entalpia na espontaneidade da reação a 298K. **B)** Considerando que os parâmetros termodinâmicos independem da temperatura, estime a temperatura a partir da qual a espontaneidade da reação será oposta em relação ao resultado obtido no item A.



	CaCO <sub>3</sub> (s)	CaO(s)	CO <sub>2</sub> (g)
Δ <sub>f</sub> G° (298K, kJ/mol)	<b>-1129,16</b>	<b>-603,42</b>	<b>-394,36</b>
Δ <sub>f</sub> H° (298K, kJ/mol)	<b>-1207,6</b>	<b>-635,09</b>	<b>-393,51</b>
S° (298K, J/K.mol)	<b>91,7</b>	<b>38,2</b>	<b>213,74</b>

**Questão 3.** Considere o diagrama de fases da pressão em função da composição para uma mistura dos componentes C e B. Responda:

- A) Indique no gráfico a(s) região(ões) onde as fases líquida e vapor estão em equilíbrio;
  - B) Indique no gráfico a(s) região(ões) onde existe somente a fase líquida;
  - C) Indique no gráfico a(s) região(ões) onde existe somente a fase vapor;
  - D) Discurse sobre o ponto no gráfico de coordenadas  $x_{B,1}$  e  $P_{máx}$ , incluindo e relacionando corretamente em sua discussão todos os seguintes termos: **destilação, composição do condensado, purificação, misturas ideais e forças intermoleculares.**



Fonte: LEVINE, I.N Físico-Química. Rio de Janeiro, RJ: LTC, 2012. vol 1.



CPF/PASSAPORTE: \_\_\_\_\_

4

### Formulário

Gases Ideais e Reais:

$$pV = nRT$$

$$Z = \frac{pV_m}{RT}$$

Trabalho de expansão:  $w = - \int_{V_1}^{V_2} p_{ext} dV$

Relações Termodinâmicas:

$U = q + w$	$H = U + pV$	$G = H - TS$	$A = U - TS$
	$dS = \frac{dq_{rev}}{T}$	$dG = Vdp - SdT$	$dH = Vdp + TdS$
$a_B = \gamma_B c_B$	onde $c$ é a molalidade:	$c = \frac{n_{sóluto}}{m_{sólvente}}$	em $mol \times kg^{-1}$
$\gamma_{\pm} = (\gamma_{+}\gamma_{-})^{\frac{1}{2}}$	$\log \gamma_{\pm} = - z_{+}z_{-} AI^{\frac{1}{2}}$	$I = \frac{1}{2} \sum_i z_i^2 \left( \frac{c}{c^0} \right)$	$A = 0,509$ a $25^{\circ}C$
$\Delta_r G = \left( \frac{\partial G}{\partial \xi} \right)_{p,T}$	$\Delta_r G = \Delta_r G^0 + RT \ln Q$	$\Delta_r G = -nFE$	$E = E^0 - \frac{RT}{nF} \ln Q$
$\log_{10} k = \log_{10} A - \frac{E_a}{2,303 \cdot R T} \frac{1}{1}$		$\Delta_r H^o = \sum \Delta_f H^o_{produtos} - \sum \Delta_f H^o_{reagentes}$	

Constantes Fundamentais:

Constante de Faraday ( $F$ ): 96500 C/mol

Constante dos Gases ( $R$ ): 8,314 J/K.mol ou 0,08205 L.atm/K.mol

Fatores de Conversão:

$$\theta^{\circ}C = T/K - 273$$

$$1 \text{ atm} = 101,3 \text{ kPa} = 760 \text{ Torr}$$



CPF/PASSAPORTE: \_\_\_\_\_

5

## RASCUNHO