

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:

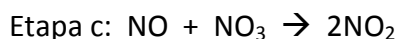
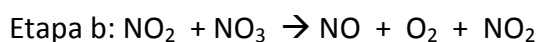
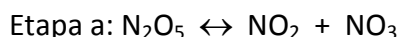
- 1) O candidato deverá identificar-se apenas com o número de seu CPF (brasileiros/estrangeiros) ou passaporte (estrangeiros) no local indicado do caderno de questões, bem como nas folhas pautadas. Não poderá haver qualquer outra identificação do candidato, sob pena de sua desclassificação.
- 2) O candidato 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

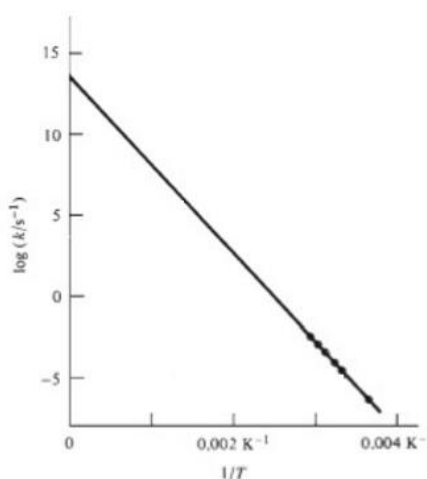
QUÍMICA FÍSICO-QUÍMICA

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

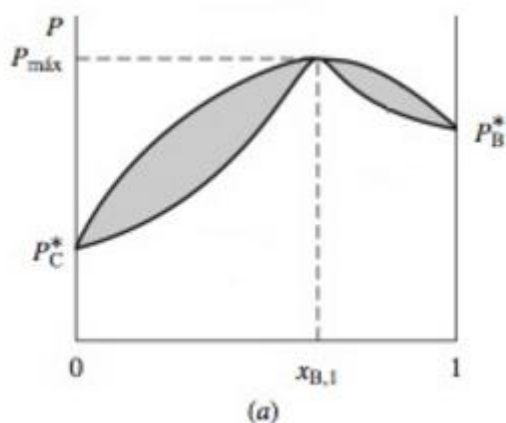
Questão 2. A) Calcule a variação de energia livre padrão, $\Delta_r G^\circ$ para a reação a seguir a 298K. A reação é espontânea no equilíbrio? Justifique considerando a contribuição da entropia e da entalpia na espontaneidade da reação a 298K. **B)** Considerando que os parâmetros termodinâmicos independem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



	CaCO ₃ (s)	CaO(s)	CO ₂ (g)
$\Delta_f G^\circ$ (298K, kJ/mol)	-1129,16	-603,42	-394,36
$\Delta_f H^\circ$ (298K, kJ/mol)	-1207,6	-635,09	-393,51
S° (298K, J/K.mol)	91,7	38,2	213,74

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

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



CPF/PASSAPORTE: _____

4

Formulário

Gases Ideais e Reais:

$$pV = nRT$$

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

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

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:	$c = \frac{n_{soluto}}{m_{solvente}}$	em $mol \times kg^{-1}$
$\gamma_{\pm} = (\gamma_+ \gamma_-)^{\frac{1}{2}}$	$\log \gamma_{\pm} = - z_+ z_- A I^{\frac{1}{2}}$	$I = \frac{1}{2} \sum_i z_i^2 \left(\frac{c}{c^0}\right)$	$A = 0,509$ a $25^\circ C$
$\Delta_r G = \left(\frac{\partial G}{\partial \xi}\right)_{p,T}$	$\Delta_r G = \Delta_r G^0 + RT \ln Q$	$\Delta_r G = -nFE$	$E = E^0 - \frac{RT}{nF} \ln Q$
$\log_{10} k = \log_{10} A - \frac{E_a}{2,303 \cdot R T}$	$\Delta_r H^0 = \sum \Delta_f H^0_{produtos} - \sum \Delta_f H^0_{reagentes}$		

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:

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

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



UDESC
UNIVERSIDADE
DO ESTADO DE
SANTA CATARINA

UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA – UDESC
CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS – CCT
COORDENADORIA DE ENSINO DE PÓS-GRADUAÇÃO – CEPG
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA – PPGQ
MESTRADO EM QUÍMICA APLICADA

CPF/PASSAPORTE: _____

5

RASCUNHO