



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS  
CENTRO DE CIÊNCIAS QUÍMICAS, FARMACÊUTICAS E DE ALIMENTOS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA  
EXAME DE SELEÇÃO PARA INGRESSO NO PPGQ – 2025/02  
NÍVEL MESTRADO E DOUTORADO

Candidato(a) Número: \_\_\_\_\_

### REGRAS GERAIS PARA REALIZAÇÃO DA PROVA

1. **Não coloque seu nome na prova;**
2. Coloque o número correspondente da lista de presença no local reservado em todas as folhas;
3. Para realização da prova serão entregues 8 (oito) folhas, as quais contêm as questões das seguintes áreas: Físico-Química, Química Analítica, Química Inorgânica e Química Orgânica;
4. As respostas devem ser a caneta, abaixo da referida questão, podendo ser utilizado o verso da folha, caso necessário;
5. As folhas de rascunho, fornecidas pela comissão de seleção, deverão ser entregues juntamente com a prova;
6. A duração da prova é de 4 (quatro) horas e será comunicado aos presentes quando faltarem 20 minutos para seu término;
7. O candidato poderá utilizar para resolução das questões: caneta esferográfica, lápis ou lapiseira, borracha, calculadora e régua;
8. A Tabela Periódica será fornecida juntamente com a prova;
9. Os 2 (dois) últimos candidatos deverão permanecer na sala até que ambos entreguem a prova;
10. Comprovante(s) de artigo(s) aceito(s) recentemente, após o período de inscrição, pode(m) ser entregue(s) para a comissão até o início da prova escrita.



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS  
CENTRO DE CIÊNCIAS QUÍMICAS, FARMACÊUTICAS E DE ALIMENTOS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA  
PROVA DE FÍSICO-QUÍMICA – 2025/02

Candidato(a) Número: \_\_\_\_\_

**Questão 1.** Um dos maiores problemas recentes é o aquecimento global antropogênico, causado pelo acúmulo de  $\text{CO}_2$  na atmosfera. Capturar e reduzir o  $\text{CO}_2$  é uma das alternativas, por exemplo, formando metanol como produto através da reação  $\text{CO}_2(\text{g}) + 3 \text{H}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}(\text{g}) + \text{H}_2\text{O}(\text{g})$ . Com base nos dados termodinâmicos abaixo:

- Calcule a energia de Gibbs-padrão para a reação a 298 K.
- Calcule a constante de equilíbrio-padrão a 298 K. Há mais reagentes ou produtos na mistura em equilíbrio?
- Quanto de  $\text{H}_2$  (em massa) seriam necessários para capturar um quilograma de  $\text{CO}_2$ ?

Tabela 1. Dados termodinâmicos de compostos a 298 K.

	$M$ (g/mol)	$\Delta_f H^\circ$ (kJ/mol)	$\Delta_f G^\circ$ (kJ/mol)	$S_m^\circ$ (J/(K mol))
$\text{CO}_2(\text{g})$	44,01	- 393,51	-394,36	213,74
$\text{H}_2(\text{g})$	2,016	0	0	130,684
$\text{CH}_3\text{OH}(\text{g})$	32,04	-238,66	-166,27	126,8
$\text{H}_2\text{O}(\text{g})$	18,015	-241,82	-228,57	188,83



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS  
CENTRO DE CIÊNCIAS QUÍMICAS, FARMACÊUTICAS E DE ALIMENTOS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA  
PROVA DE FÍSICO-QUÍMICA – 2025/02

Candidato(a) Número: \_\_\_\_\_

**Questão 2.** A utilização de catalisadores é uma alternativa para otimizar a reação de redução do  $\text{CO}_2$ , que possui uma cinética bastante lenta. Diversos catalisadores já foram propostos para esta reação, como os MOFs (estruturas orgânicas metálicas) e complexos de metais de transição.

(a) Defina catalisador e descreva seus possíveis efeitos na cinética e termodinâmica da reação.

(b) No desenvolvimento de um catalisador, foi observado que a taxa de velocidade da reação é duplicada quando a temperatura é aumentada de  $20^\circ\text{C}$  a  $50^\circ\text{C}$ . Calcule a energia de ativação da reação catalisada.

**Formulário**

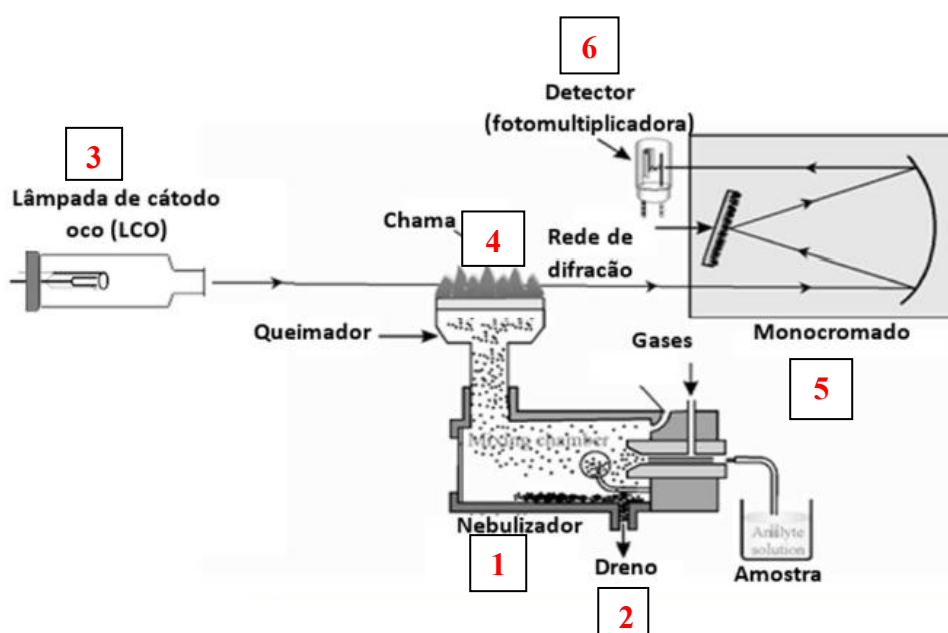
$$pV = nRT \quad | \quad \Delta U = q + W \quad | \quad w = -p \Delta V \quad | \quad \Delta_r G^0 = -RT \ln K^0 \quad | \quad n = \frac{m}{M}$$

$$T/\text{K} = T/^\circ\text{C} + 273,15 \quad | \quad R = 8,314 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1} = 0,082 \text{ L}\cdot\text{atm}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1} \quad | \quad \Delta_r G^0 = \Delta_r H^0 - T \Delta_r S^0$$

$$\Delta_r G^0 = \sum_i \nu_i \Delta_f G_i^0 \quad | \quad \frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + kt \quad | \quad \ln\left(\frac{k_2}{k_1}\right) = -\frac{E_a}{R}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right) \quad | \quad k = \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$

Candidato(a) Número: \_\_\_\_\_

- 1) Explique o fundamento da técnica de Espectrometria de Absorção Atômica, bem como defina a principal função de cada componente enumerado na Figura abaixo, a qual traz uma representação geral do funcionamento de um espectrômetro.





UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS  
CENTRO DE CIÊNCIAS QUÍMICAS, FARMACÊUTICAS E DE ALIMENTOS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA  
PROVA DE QUÍMICA ANALÍTICA – 2025/02

Candidato(a) Número: \_\_\_\_\_

- 2) Sabe-se que o Método de Volhard se caracteriza por ser um método indireto para determinação de cloretos:
- a) Desta forma, explique como se dá a determinação destes íons em solução a partir do respectivo método de análise.
- b) Em uma solução de um sal determinou-se Cloretos pelo Método de Volhard. Uma alíquota de 10 mL da solução é tratada com 15 mL de solução padrão de  $\text{AgNO}_3$   $0,1182 \text{ mol.L}^{-1}$ . O excesso de prata foi titulado com uma solução padrão de  $\text{KSCN}$   $0,101 \text{ mol.L}^{-1}$ , gastando-se 2,38 mL para que surgisse a cor vermelha do indicador, indicando o ponto final.
- Calcule a concentração de Cloretos na solução do sal analisado em g/L.



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS  
CENTRO DE CIÊNCIAS QUÍMICAS, FARMACÊUTICAS E DE ALIMENTOS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA  
PROVA DE QUÍMICA INORGÂNICA – 2025/02

Candidato(a) Número: \_\_\_\_\_

Os compostos inorgânicos  $\text{PCl}_3$  e  $\text{AlCl}_3$  possuem o mesmo número de átomos de cloro ligados ao átomo central, porém apresentam diferentes geometrias de pares e moleculares.

a) Indique qual é a geometria de pares de cada composto.

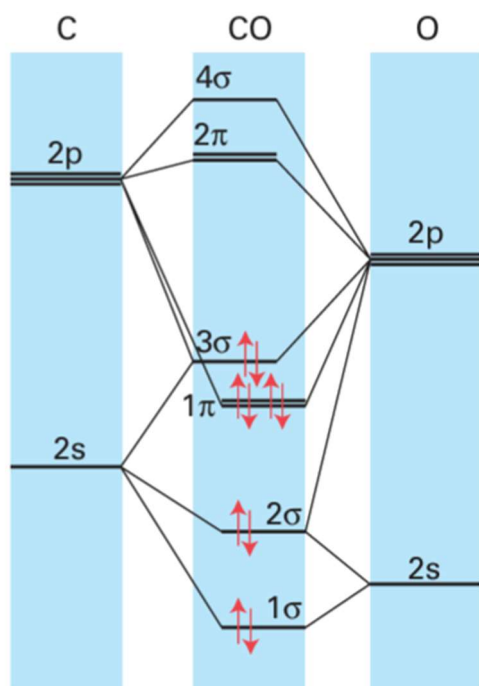
b) Indique qual é a geometria molecular de cada composto. Desenhe a estrutura de acordo com a geometria molecular.

c) Mostre quais elementos de simetria ( $E$ ,  $C_n$ ,  $S_n$ ,  $i$ ,  $\sigma_v/h$ ) podem ser observados nos compostos.

d) Verifique se os compostos podem atuar como ácidos ou bases de Lewis. Justifique!

Candidato(a) Número: \_\_\_\_\_

A sobreposição de orbitais atômicos do carbono e do oxigênio dá origem aos orbitais moleculares do monóxido de carbono, uma molécula diatômica heteronuclear. O diagrama de energia do monóxido de carbono pela Teoria do Orbital Molecular (TOM) está mostrado abaixo.



a) Indique quais são os orbitais de fronteira HOMO e LUMO da molécula de monóxido de carbono.

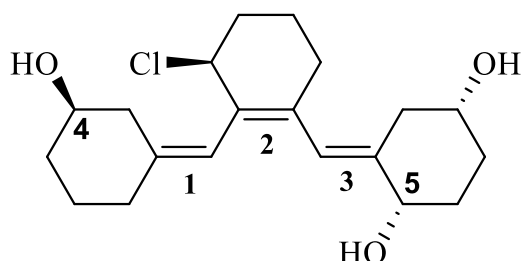
b) O que se pode esperar quando moléculas de monóxido de carbono são submetidas a um campo magnético externo?

c) A molécula de monóxido de carbono pode coordenar-se a um centro metálico, sendo conhecida a partir de então como ligante carbonila. Os complexos do tipo metal-carbonila apresentam alta estabilidade. Explique a origem desta estabilidade e indique qual(is) orbital(is) do CO no diagrama estão envolvidos na coordenação com o centro metálico.

Candidato(a) Número: \_\_\_\_\_

**QUESTÃO 1:**

Analise atentamente a molécula apresentada abaixo e responda:



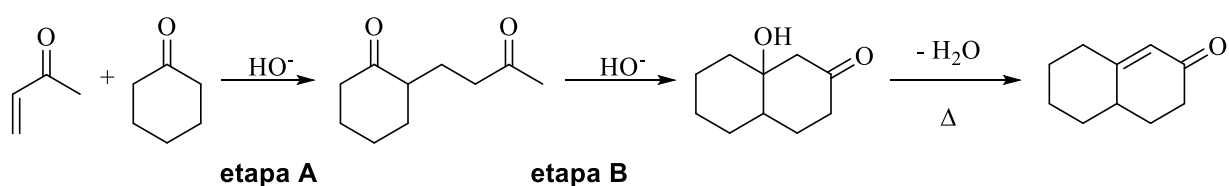
a) Classifique as ligações duplas numeradas (**1**, **2** e **3**) quanto à configuração *Z* ou *E*, justificando em cada caso com base nas regras de prioridade de Cahn–Ingold–Prelog.

b) Determine a configuração absoluta (*R* ou *S*) dos carbonos assimétricos numerados (**4** e **5**), apresentando a justificativa para sua escolha.

Candidato(a) Número: \_\_\_\_\_

**QUESTÃO 2:**

Considere o esquema de reação fornecido:



a) Represente detalhadamente o mecanismo correspondente à **etapa A** e à **etapa B**, indicando o movimento de elétrons e intermediários formados.

b) Identifique a que tipo de **reação nomeada** corresponde o processo global ilustrado no esquema acima.