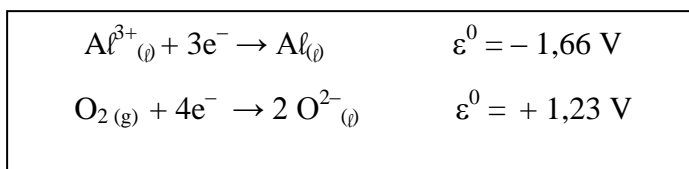


Questão 1

O alumínio metálico pode ser produzido a partir do mineral **bauxita** (mistura de óxidos de alumínio, ferro e silício). Trata-se de um processo de produção caro, pois exige muita energia elétrica. A última etapa do processo envolve a eletrólise de uma mistura de alumina (Al_2O_3) e criolita (Na_3AlF_6) na temperatura de $1000\text{ }^\circ\text{C}$. As paredes do recipiente que ficam em contato com a mistura funcionam como cátodo, e os cilindros constituídos de grafite, mergulhados na mistura, funcionam como ânodo.

Dados:



Responda ao que se pede.

- a) Explícite qual semirreação ocorre no ânodo e qual ocorre no cátodo.

Reação do ânodo:	$2\text{O}^{2-}_{(l)} \rightarrow \text{O}_{2(g)} + 4\text{e}^-$
Reação do cátodo:	$\text{Al}^{3+}_{(l)} + 3\text{e}^- \rightarrow \text{Al}_{(l)}$

- b) Escreva a equação equilibrada que representa a reação global e calcule a variação de potencial do processo.

Equação Global	Cálculo
$4\text{Al}^{3+}_{(l)} + 6\text{O}^{2-}_{(l)} \rightarrow 3\text{O}_{2(g)} + \text{Al}_{(l)}$	$\Delta\varepsilon^0 = -1,66 - 1,23\text{ V}$ $\Delta\varepsilon^0 = -2,89\text{ V}$

- c) O processo é espontâneo? Justifique a sua resposta.

Não. Pois se trata de uma eletrólise que é um processo com variação de potencial negativa.

Questão 2

Alguns óxidos gasosos de nitrogênio e carbono são poluentes atmosféricos. A reação de NO_2 com monóxido de carbono gera NO e dióxido de carbono. Em um estudo cinético dessa reação, foram obtidos os seguintes dados para a velocidade da reação química em função das concentrações iniciais dos reagentes:

$[\text{NO}_2]$ (mol L^{-1})	$[\text{CO}]$ (mol L^{-1})	Velocidade de reação ($\text{mol L}^{-1} \text{s}^{-1}$)	Temperatura (K)
0,002	0,002	$1,0 \times 10^{-5}$	350
0,004	0,002	$4,0 \times 10^{-5}$	350
0,004	0,004	$4,0 \times 10^{-5}$	350
0,004	0,004	$6,0 \times 10^{-5}$?

- a) Escreva a equação química balanceada que representa essa reação.



- b) Qual é a lei de velocidade para essa reação química?

$$v = k[\text{NO}_2]^2$$

- c) Qual é o valor da constante de velocidade dessa reação a 350 K? Apresente os cálculos.

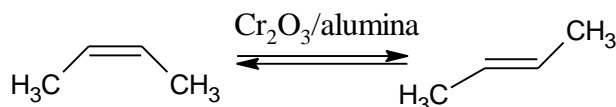
$$k = \frac{v}{[\text{NO}_2]^2} = \frac{1,0 \times 10^{-5}}{(0,002)^2} = 2,5$$

- d) A temperatura da reação na última linha da tabela acima é maior, menor ou igual às outras três temperaturas de reação? Justifique sua resposta.

A temperatura é maior. Uma vez que nesse ponto as concentrações de NO_2 e CO são iguais e houve um aumento na velocidade de reação, ocorreu um aumento na temperatura da reação.

Questão 3

A isomerização do *cis*-2-buteno a *trans*-2-buteno no estado gasoso pode ser realizada na presença do catalisador Cr₂O₃/alumina, como apresentado na equação química abaixo:



Essa reação química tem constante de equilíbrio igual a 1,41 a 709 K (Fonte: Happel, Hnatov, Mezaki, *Journal of Chemical and Engineering Data*, 1971, **16**, 206-209).

- a) Se 5,0 g de *cis*-2-buteno forem adicionados a um recipiente de 1,0 L e aquecidos a 709 K na presença de Cr₂O₃/alumina, calcule a concentração de *cis*-2-buteno e *trans*-2-buteno quando o equilíbrio químico for atingido.

$M(\text{C}_4\text{H}_8) = 56,0 \text{ g mol}^{-1}$ $n(\text{cis-C}_4\text{H}_8)_{\text{inicial}} = 5,0\text{g} / 56,0 \text{ g mol}^{-1} = 0,089 \text{ mol}$ $V = 1,0 \text{ L} \rightarrow [\text{cis-C}_4\text{H}_8]_{\text{inicial}} = 0,089 \text{ mol L}^{-1}$ $K = \frac{[\text{trans-C}_4\text{H}_8]_{\text{eq}}}{[\text{cis-C}_4\text{H}_8]_{\text{eq}}} = \frac{\alpha}{0,089 - \alpha} = 1,41$ $(0,089 - \alpha) \cdot 1,41 = \alpha$ $\alpha = 0,052$	$[\text{trans-C}_4\text{H}_8]_{\text{eq}} = \alpha = 0,052 \text{ mol L}^{-1}$ $= 2,912 \text{ g L}^{-1}$ $[\text{cis-C}_4\text{H}_8]_{\text{eq}} = 0,089 - \alpha = 0,037 \text{ mol L}^{-1}$ $= 2,072 \text{ g L}^{-1}$
--	---

- b) Depois que o equilíbrio foi atingido, mais 1,0 g de *trans*-2-buteno foi adicionado ao recipiente da reação. Calcule a nova concentração do *cis*-2-buteno no equilíbrio.

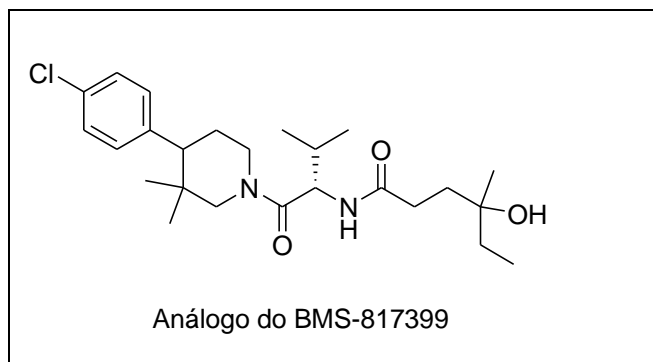
$n(\text{trans-C}_4\text{H}_8)_{\text{adicionado}} = 1,0\text{g} / 56,0 \text{ g mol}^{-1}$ $= 0,018 \text{ mol}$ $[\text{trans-C}_4\text{H}_8]_{\text{in}} = (0,052 + 0,018) \text{ mol L}^{-1}$ $= 0,070 \text{ mol L}^{-1}$ $K = \frac{[\text{trans-C}_4\text{H}_8]_{\text{eq}}}{[\text{cis-C}_4\text{H}_8]_{\text{eq}}} = \frac{0,070 - \alpha}{0,037 + \alpha} = 1,41$	$(0,037 + \alpha) \cdot 1,41 = 0,070 - \alpha$ $\alpha = 0,0075$ $[\text{cis-C}_4\text{H}_8]_{\text{eq}} = 0,0445 \text{ mol L}^{-1}$ $= 2,48 \text{ g L}^{-1}$
---	---

- c) Sem fazer cálculos, prediga o que deve ocorrer com a concentração das substâncias no item (a) se o volume do recipiente for diminuído pela metade, sem a adição de nenhuma das espécies.

Com a diminuição do volume pela metade, sem adição de nenhuma espécie, a concentração das duas espécies dobra de valor.

Questão 4

Um composto análogo do BMS-817399, representado pela estrutura química abaixo, vem sendo reconhecido como candidato para tratamento de artrite.



Considerando a estrutura química e as possíveis reações desse composto, responda às questões a seguir.

a) A reação química do composto com uma solução aquosa ácida produz, preferencialmente, uma mistura de isômeros geométricos. Escreva o nome da reação química e a estrutura de um dos isômeros.

Nome da reação	Estrutura do isômero
Eliminação ou Desidratação	<p style="text-align: right;">(1,0 ponto)</p>

b) Forneça a estrutura química do produto de maior massa molar, obtido pela reação da mistura de compostos gerados no item acima com o ozônio.

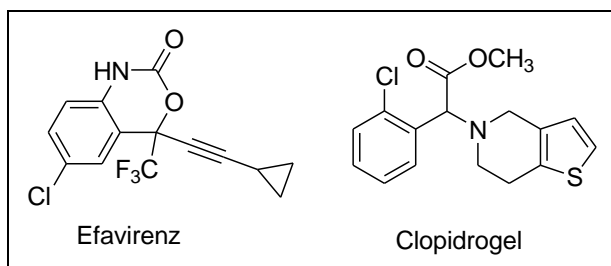
Estrutura
<p style="text-align: right;">(1,0 ponto)</p>

c) Uma das etapas de síntese do análogo do BMS-817399 é a reação de cloração do anel aromático. Considerando esse tipo de reação orgânica, represente a equação química para a cloração do tolueno (metilbenzeno). Informe as posições preferenciais para a cloração e justifique a sua resposta.

Equação química	Posições preferenciais e justificativa
<p style="text-align: right;">(1,0 ponto)</p>	<p>Posições: orto; para Justificativa: o radical (CH₃) é orto/para dirigente.</p>

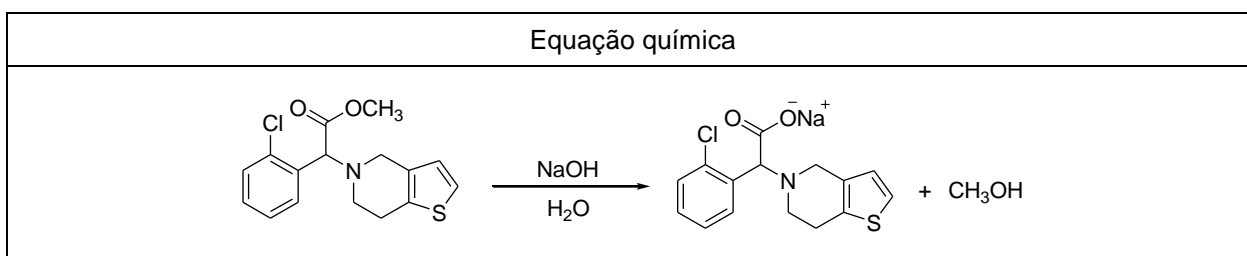
Questão 5

O Efavirenz e o Clopidogrel, cujas estruturas estão representadas a seguir, são fármacos de alta rentabilidade da indústria farmacêutica utilizados no tratamento de doenças virais e neurodegenerativas, respectivamente.



Responda às questões abaixo.

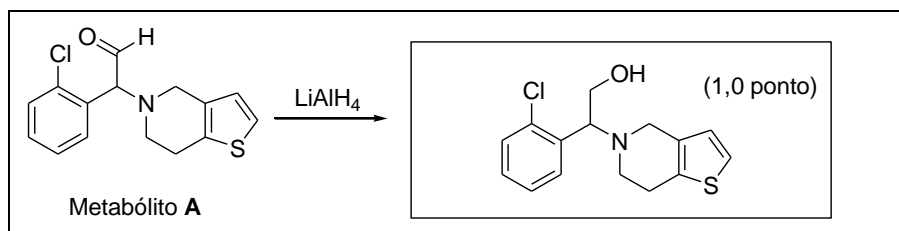
a) Escreva a equação química para a reação do Clopidogrel com uma solução aquosa de NaOH.



b) O composto Clopidogrel apresenta qual tipo de isomeria? Represente a estrutura química de um dos isômeros.

Isomeria	Estrutura química do isômero
Óptica	ou

c) O Clopidogrel apresenta o metabólito **A**, cuja estrutura química está representada abaixo. Dê o produto principal da reação entre o metabólito **A** e o hidreto de lítio e alumínio (LiAlH₄).



d) Qual é a estrutura química do produto principal formado pela reação de 1 mol de Efavirenz na presença de 2 moles de Br₂.

Estrutura química do produto	
	(1,0 ponto)

CLASSIFICAÇÃO PERIÓDICA DOS ELEMENTOS

1

18

		Número Atômico \leftarrow \rightarrow Zx																																																																																							
		Massa Atômica \leftarrow A \rightarrow																																																																																							
1	2	3										4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18																																																															
^1_1H 1,0	^2_2He 4,0											^3_3Li 6,9	^4_4Be 9,0	$^{11}_{11}\text{Na}$ 23,0	$^{12}_{12}\text{Mg}$ 24,3	$^{19}_{19}\text{K}$ 39,1	$^{20}_{20}\text{Ca}$ 40,1	$^{37}_{37}\text{Rb}$ 85,5	$^{85}_{85}\text{Cs}$ 132,9	$^{132}_{132}\text{Ba}$ 137,3	$^{87}_{87}\text{Fr}$ 223,0	$^{88}_{88}\text{Ra}$ 226,0	$^{89-102}$	$^{21}_{21}\text{Sc}$ 45,0	$^{22}_{22}\text{Ti}$ 47,9	$^{39}_{39}\text{Y}$ 88,9	$^{40}_{40}\text{Zr}$ 91,2	$^{71}_{71}\text{Lu}$ 175	$^{72}_{72}\text{Hf}$ 178,5	$^{103}_{103}\text{Ta}$ 180,9	$^{104}_{104}\text{Rf}$ 183,8	$^{257}_{257}\text{Ta}$	$^{23}_{23}\text{V}$ 50,9	$^{24}_{24}\text{Cr}$ 52,0	$^{39}_{39}\text{Y}$ 88,9	$^{40}_{40}\text{Zr}$ 91,2	$^{73}_{73}\text{Ta}$ 180,9	$^{74}_{74}\text{W}$ 183,8	$^{105}_{105}\text{Db}$ 271	$^{106}_{106}\text{Sg}$ 271	$^{267}_{267}\text{Ta}$	$^{25}_{25}\text{Mn}$ 54,9	$^{26}_{26}\text{Fe}$ 55,8	$^{41}_{41}\text{Nb}$ 92,9	$^{42}_{42}\text{Mo}$ 95,9	$^{75}_{75}\text{Re}$ 186,2	$^{76}_{76}\text{Os}$ 190,2	$^{107}_{107}\text{Bh}$ 272	$^{108}_{108}\text{Hs}$ 270	$^{268}_{268}\text{Ta}$	$^{27}_{27}\text{Co}$ 58,9	$^{28}_{28}\text{Ni}$ 58,7	$^{43}_{43}\text{Tc}$ 98,9	$^{44}_{44}\text{Ru}$ 101,1	$^{77}_{77}\text{Ir}$ 192,2	$^{78}_{78}\text{Pt}$ 195,1	$^{109}_{109}\text{Mt}$ 276	$^{110}_{110}\text{Ds}$ 281	$^{272}_{272}\text{Ta}$	$^{29}_{29}\text{Cu}$ 63,5	$^{30}_{30}\text{Zn}$ 65,4	$^{45}_{45}\text{Rh}$ 102,9	$^{46}_{46}\text{Pd}$ 106,4	$^{79}_{79}\text{Au}$ 197,0	$^{80}_{80}\text{Hg}$ 200,6	$^{111}_{111}\text{Rg}$ 280	$^{112}_{112}\text{Uub}$ 285	$^{271}_{271}\text{Ta}$	$^{31}_{31}\text{Ga}$ 69,7	$^{32}_{32}\text{Ge}$ 72,6	$^{47}_{47}\text{Ag}$ 107,9	$^{48}_{48}\text{Cd}$ 112,4	$^{81}_{81}\text{Tl}$ 204,4	$^{82}_{82}\text{Pb}$ 207,2	$^{113}_{113}\text{Uut}$ 284	$^{114}_{114}\text{Uuq}$ 289	$^{33}_{33}\text{As}$ 74,9	$^{34}_{34}\text{Se}$ 79,0	$^{50}_{50}\text{Sn}$ 118,7	$^{51}_{51}\text{Sb}$ 121,8	$^{83}_{83}\text{Bi}$ 209,0	$^{84}_{84}\text{Po}$ 210,0	$^{113}_{113}\text{Uub}$ 285	$^{35}_{35}\text{Br}$ 79,9	$^{53}_{53}\text{I}$ 126,9	$^{85}_{85}\text{At}$ 210,0	$^{36}_{36}\text{Kr}$ 83,8	$^{54}_{54}\text{Xe}$ 131,3	$^{86}_{86}\text{Rn}$ 222,0

SÉRIE DOS LANTANÍDEOS

$^{57}_{57}\text{La}$ 138,9	$^{58}_{58}\text{Ce}$ 140,1	$^{59}_{59}\text{Pr}$ 140,9	$^{60}_{60}\text{Nd}$ 144,2	$^{61}_{61}\text{Pm}$ 146,9	$^{62}_{62}\text{Sm}$ 150,4	$^{63}_{63}\text{Eu}$ 152,0	$^{64}_{64}\text{Gd}$ 157,3	$^{65}_{65}\text{Tb}$ 158,9	$^{66}_{66}\text{Dy}$ 165,5	$^{67}_{67}\text{Ho}$ 164,9	$^{68}_{68}\text{Er}$ 167,3	$^{69}_{69}\text{Tm}$ 168,9	$^{70}_{70}\text{Yb}$ 173,0
--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------

SÉRIE DOS ACTINÍDEOS

$^{89}_{89}\text{Ac}$ 227,0	$^{90}_{90}\text{Th}$ 232,0	$^{91}_{91}\text{Pa}$ 231,0	$^{92}_{92}\text{U}$ 238,0	$^{93}_{93}\text{Np}$ 237,1	$^{94}_{94}\text{Pu}$ 239,1	$^{95}_{95}\text{Am}$ 241,1	$^{96}_{96}\text{Cm}$ 244,1	$^{97}_{97}\text{Bk}$ 249,1	$^{98}_{98}\text{Cf}$ 251	$^{99}_{99}\text{Es}$ 252	$^{100}_{100}\text{Fm}$ 257,1	$^{101}_{101}\text{Md}$ 258,1	$^{102}_{102}\text{No}$ 259,1
--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	-------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	------------------------------	------------------------------	----------------------------------	----------------------------------	----------------------------------