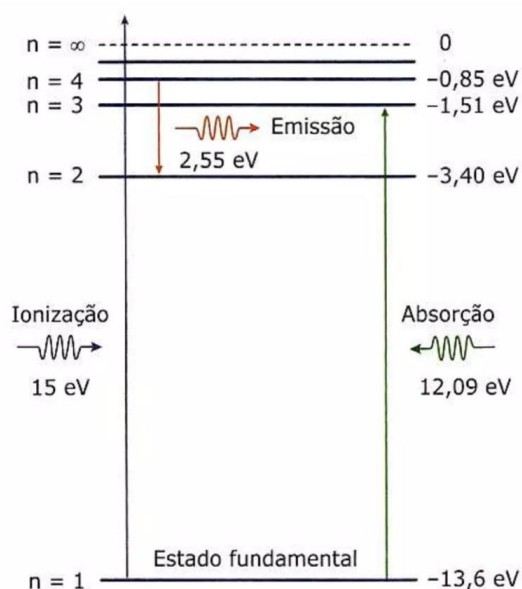


PROVA MODALIDADE A
3ª FASE OQEP 2024

QUESTÃO 1 (100 PONTOS)

Níveis de Energia (n) de um elétron num átomo de hidrogênio.

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2}$$



O modelo atômico de Bohr, proposto por Niels Bohr em 1913, foi um grande avanço para a compreensão da estrutura atômica e, especialmente, para o átomo de hidrogênio. Este modelo descreve o átomo de forma quantizada, com elétrons movendo-se em órbitas bem definidas ao redor do núcleo, cada uma com uma energia específica. A imagem acima descreve as energias em níveis eletrônicos específicos, onde, n , é número inteiro e o elétron pode absorver energia e “saltar” em diferentes valores de n , não sendo permitido permanecer entre estes níveis energéticos.

<https://www.sciencedirect.com/topics/engineering/bohr-atom>

a) Pergunta-se, inicialmente, o que se observa com a energia na imagem à medida que n aumenta, explique esta variação. (30 pontos)

À medida que o número quântico principal (ou nível eletrônico) aumenta, a energia dos elétrons no átomo também aumenta. O que descreve com que os elétrons se encontram cada vez mais afastados do núcleo e menos fortemente atraídos por ele. O que traduz que o aumento da distância com relação ao núcleo vai diminuindo a atração eletrostática entre o núcleo e o elétron, o que provoca uma energia menos negativa (mais próxima de zero).

b) Suponha que em um determinado experimento foi descoberto em um sistema formado de gás hidrogênio, cujo elétron deste sistema encontra-se em um estado de maior energia. Em determinado instante, observou-se uma variação de energia entre estes níveis ($n_x \rightarrow n_1$) igual a 13230 meV, fazendo com que o sistema emitisse um espectro de ondas eletromagnéticas. Pergunta-se, o nível de energia (n_x) no qual encontrou-se este elétron excitado. **(40 pontos)**.

Conforme se observa na imagem, a Energia de um determinado nível eletrônico (E_n) é dada por: $E_n = -13,6/n^2$, onde:

E_n é a energia de um determinado nível n , onde n é o número quântico principal.

Dado que a variação de energia entre os níveis n_x e n_1 apresenta um $\Delta E = 13230$ meV.

Como sabemos que essa variação de energia ocorre entre o nível n_x (estado excitado) e $n=1$ para $n = 1$ (estado fundamental), temos que:

$$\Delta E = E_{n_x} - E_1$$

$$13,23 = -\frac{13,6}{n_x^2} - (-13,6)$$

$$13,23 = 13,6 \left(1 - \frac{1}{n_x^2}\right)$$

Dividindo ambos os lados por 13,6:

$$\frac{13,23}{13,6} = 1 - \frac{1}{n_x^2}$$

$$0,973 = 1 - \frac{1}{n_x^2}$$

Isolando $1/n_x^2$

$$\frac{1}{n_x^2} = 1 - 0,973$$

$$\frac{1}{n_x^2} = 0,027$$

Invertendo ambos os lados para encontrar n_x^2 , têm-se:

$$n_x^2 = \frac{1}{0,027}$$

$$n_x^2 \approx 37,04$$

Portanto, o nível de energia n_x , no qual o elétron estava excitado é aproximadamente 6.

c) A energia de ionização está relacionada com o fator Z^2/n^2 , ou seja, com a carga nuclear (número atômico Z) cujo valor, aumenta mais rapidamente que o número quântico principal (n), daí esperaríamos um aumento contínuo do potencial de ionização, ou seja, a energia necessária para retirar um elétron do átomo em seu estado gasoso. Entretanto, observa-se uma diminuição da energia de ionização dos átomos de hidrogênio para os átomos de lítio (1312 kJ/mol e 520 kJ/mol, respectivamente). Evidencie as razões para esta diminuição através da descrição de determinados efeitos que provocam estas variações, exemplifique. **(30 pontos)**

A diminuição da energia de ionização entre o hidrogênio e o lítio, apesar do aumento do número atômico, e conforme se descreve por z^2/n^2 , o que justificaria um aumento desta energia, pode ser explicada principalmente por dois efeitos importantes: o efeito de blindagem (ou efeito de proteção) e a distância com relação ao núcleo. Para os átomos de hidrogênio ($Z = 1$), existe apenas um elétron na camada 1s, então ele sente diretamente a atração do núcleo, sem nenhuma blindagem de outros elétrons. Já no caso do lítio ($Z = 3$), existem três elétrons: onde dois ocupam a camada 1s (mais próxima do núcleo) e o terceiro elétron ocupa a camada 2s, mais afastada. Os dois elétrons na camada 1s "blindam" o núcleo para o elétron 2s, reduzindo a força de atração que o núcleo exerce sobre ele. Outro fator que contribui para a diminuição da energia de ionização do lítio em comparação com o hidrogênio é o aumento da distância média do elétron com relação ao núcleo. No hidrogênio, o elétron único está mais próximo do núcleo, o que permite uma atração eletrostática mais forte, o que corresponde a uma energia de ionização maior.

QUESTÃO 2 (100 PONTOS)

“Fósforo – um macronutriente essencial”

As principais funções do fósforo no metabolismo vegetal são a síntese de ATP (adenosina trifosfato) – principal fonte de energia para as plantas e a síntese de ácidos nucleicos – componentes do DNA e do RNA – essenciais para o crescimento e desenvolvimento vegetal. A carência de fósforo irá reduzir a maturidade das plantas e a produtividade das culturas.

As rochas fosfáticas sedimentares representam cerca de 80% da rocha fosfática produzida no mundo.

O P_4O_{10} é um sólido cristalino branco utilizado na síntese de fertilizantes fosfatados.

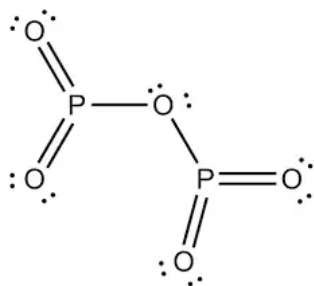
Com relação ao óxido de fósforo anteriormente citado, determine:

- A) A fórmula mínima ou empírica do referido sólido cristalino e o nox do fósforo no P_4O_{10}
(15 pontos)
- B) A estrutura de Lewis da fórmula mínima citada no item A e número de elétrons não ligantes.
(Nota: na representação estrutural não deve conter ligações covalentes coordenadas).
(15 pontos)
- C) A equação balanceada da reação de P_4O_{10} com H_2O na obtenção de ácido ortofosfórico.
(20 pontos)
- D) A quantidade de matéria (número de mols) aproximada de fósforo, contida em 1 tonelada de rocha fosfatada que contém 50%, em massa de P_4O_{10} . Admitindo que todo fósforo da rocha esteja na forma deste óxido. (Dados massas atômicas: P=31 e O=16)
(30 pontos)
- E) Determine a fórmula química dos seguintes fertilizantes:
(20 pontos)
- monohidrogenofosfato de diamônio
 - dihidrogenofosfato de potássio

Resolução

A) A fórmula mínima ou empírica desse óxido é P_2O_5 e o nox do fósforo é +5.

B) Estrutura de Lewis:



Nessa estrutura há 20 elétrons não ligantes (10 pares).

C) $P_4O_{10}(s) + 6H_2O(l) \rightarrow 4H_3PO_4(aq)$

D) Se uma tonelada de Rocha contém 50% de P_4O_{10} logo, há 500kg desse óxido.

Cálculo do número de mols de fósforo:

$$\begin{array}{l} 1 \text{ mol de } P_4O_{10} \text{ (284g)} \text{ ----- } 4 \text{ mols de P (124 de P)} \\ 500 \text{ kg ----- n} \end{array}$$

Logo: $n = 7,04 \text{ kmols de P}$ ou $7,04 \times 10^3 \text{ mols de P}$

E) I. monohidrogenofosfato de diamônio: $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$

II. dihidrogenofosfato de potássio : KH_2PO_4

QUESTÃO 3 (100 PONTOS)

Neste ano, aconteceram os Jogos Olímpicos em Paris. Tivemos o prazer de torcer pelas nossas ginastas, em especial por Rebeca Andrade, que conquistou a tão sonhada medalha de ouro no solo. Durante as performances, as ginastas passam um pó branco nas mãos, o carbonato de magnésio. Um experimento foi montado no laboratório, conforme ilustrado na figura, considerando que cada etapa tem um rendimento de 90%. Responda, apresentando os cálculos quando necessário, o que for solicitado.

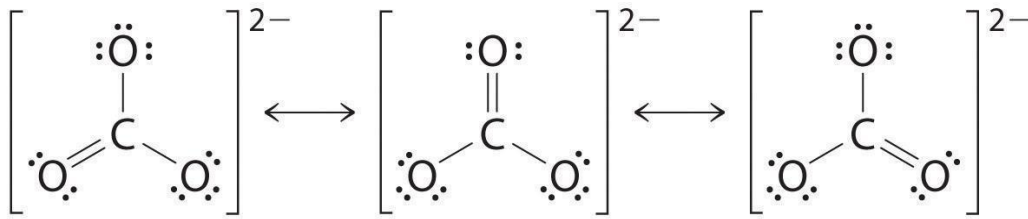
- Desenhe a(s) estrutura(s) de lewis para o íon carbonato, apresentando as estruturas de ressonância caso existam, e prediga a geometria do íon.
(5 PONTOS)
- Apresente a equação balanceada da reação que acontece na etapa I.
(5 PONTOS)
- Qual o valor de massa que a balança apresentará ao final de todo o procedimento experimental considerando que o carbonato de magnésio reagirá completamente?
(20 PONTOS)
- Considerando que o gás produzido não se solubiliza na solução e que o volume total da solução é igual ao volume escoado da bureta, e sabendo que o experimento foi realizado a 25°C em um erlenmeyer de 250 mL, determine a pressão interna atingida, assumindo que nenhum gás não escapa e que a reação ocorre com um rendimento de 90%.
(40 PONTOS)
- Qual o volume que deveria ser escoado na bureta para se obter 50 mg do citrato de magnésio na etapa III.
(30 PONTOS)

O diagrama ilustra o procedimento experimental em três etapas:

- ETAPA I:** Um sistema de titulação é montado. A bureta contém a solução de ácido cítrico, $C_6H_8O_7$, com uma concentração de $0,1 \text{ mol.L}^{-1}$. O erlenmeyer contém $MgCO_3$ com uma massa de 1 g .
- ETAPA II:** A solução de citrato de magnésio, $Mg_3(C_6H_5O_7)_2(aq)$, é adicionada ao erlenmeyer através de um funil.
- ETAPA III:** O conteúdo do erlenmeyer é transferido para uma balança analítica, que mostra uma leitura de $0,000 \text{ g}$.

Resolução:

a)



Trigonal planar

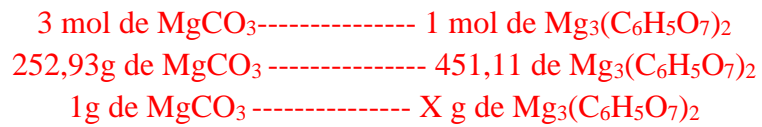
b)



c)

Massas Molares em $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$

MgCO_3	84,31
$\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$	192,12
CO_2	44,00
H_2O	18,01
$\text{C}_{12}\text{H}_{10}\text{Mg}_3\text{O}_{14}$	451,11



Como o rendimento de cada etapa é de 90%:

ETAPA I: $1,78 \text{ g} \times 0,90 = 1,60 \text{ g}$

ETAPA II: $1,60 \text{ g} \times 0,90 = 1,45 \text{ g}$

ETAPA III: $1,45 \text{ g} \times 0,90 = 1,30 \text{ g}$

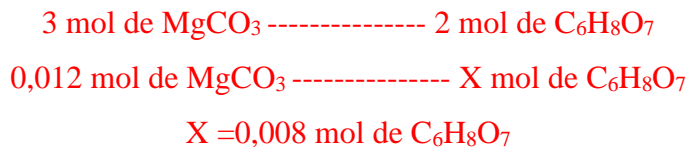
d) De acordo com a estequiometria:



Como 1g de MgCO₃ equivalem a 0,012 mol de MgCO₃, logo serão formados 0,012 mol de CO₂. Como o rendimento é de 90%:

$$0,012 \times 0,90 = 0,011 \text{ mol de CO}_2 \text{ formados.}$$

O volume ocupado pelo gás será o volume do erlenmeyer menos o volume da solução. Para calcular o volume da solução, de acordo com a estequiometria:



Para adicionar 0,008 mol de C₆H₈O₇, a partir de uma solução com concentração 0,1 mol.L⁻¹

$$V = 0,008 \text{ mol} / 0,1 \text{ mol.L}^{-1} = 0,08 \text{ L ou } 80 \text{ mL}$$

Assim, o volume será: 250 mL (erlenmeyer) - 80 mL (Solução) = 170 mL

Para calcular a pressão do CO₂:

$$\begin{array}{l} PV = nRT \\ P = (0,011 \text{ mol} \times 0,082 \text{ atm.L.mol}^{-1}\text{K}^{-1} \times 298,15 \text{ K}) / 0,170 \text{ L} \\ P = 1,58 \text{ atm} \end{array}$$

Agora pegamos a pressão dos outros gases, no início temos 250mL com uma pressão de 1atm e no final um volume de 170 mL, para descobrir a pressão no processo isotérmico:

$$\begin{array}{l} P_1 V_1 = P_2 V_2 \\ P_2 = (1 \text{ atm} \times 250 \text{ mL}) / 170 \text{ mL} \\ P_2 = 1,47 \text{ atm} \end{array}$$

Agora considerando a lei das pressões parciais de Dalton, basta adicionar a contribuição da pressão do CO₂ produzido.

$$P_T = 1,58 + 1,47$$

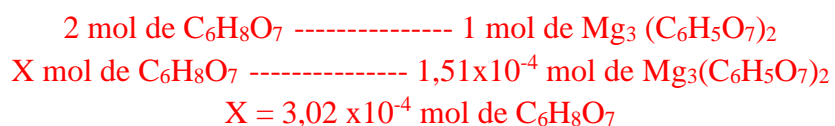
$$P_T = 3,05 \text{ atm}$$

e)

Mantendo o raciocínio anterior, cada etapa com rendimento de 90%, teremos:

$0,050\text{g}/(0,9)^3 = 0,068 \text{ g}$ massa de citrato de magnésio que deverá ser produzida para ter 50mg na etapa

III. 0,068 g equivalem a $1,51 \times 10^{-4}$ mol de citrato de magnésio. Assim:



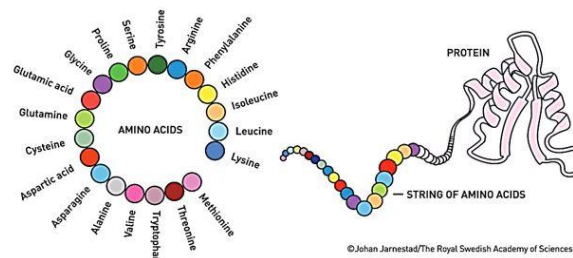
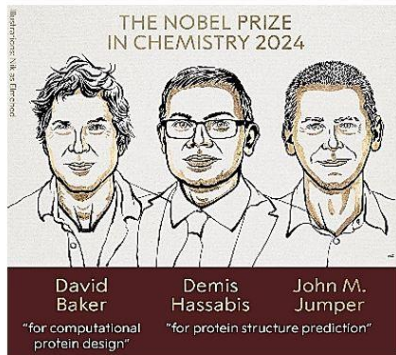
Para adicionar $3,02 \times 10^{-4}$ mol de $C_6H_8O_7$, a partir de uma solução com concentração $0,1 \text{ mol.L}^{-1}$

$$V = 3,02 \times 10^{-4} \text{ mol} / 0,1 \text{ mol.L}^{-1} = 3,02 \times 10^{-3} \text{ L ou } 3,02 \text{ mL}$$

Deveria ser escoado aproximadamente 3,02 mL da bureta.

QUESTÃO 4 (100 PONTOS)

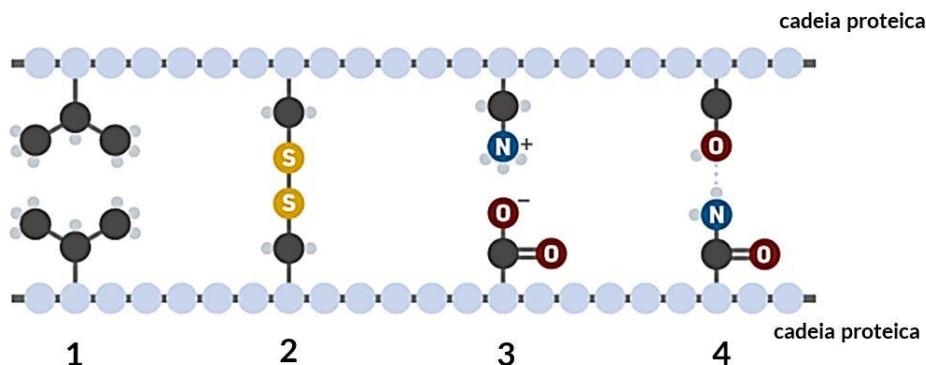
As proteínas são biomoléculas incríveis, formadas por partes menores, os aminoácidos. Naturalmente, existem pouco mais de duas dezenas deles, porém, são capazes de formar um número incrível e diverso de proteínas através das inúmeras possibilidades de combinações e formação de estruturas tridimensionais. Destaque para as estruturas tridimensionais, que determinam muitas de suas propriedades. Isso justifica o prêmio Nobel de Química de 2024 ter sido concedido aos cientistas David Baker, Demis Hassabis e John Jumper pelo design computacional e previsão da estrutura tridimensional de proteínas.



© Royal Swedish Academy of Science

Os cientistas usaram recursos de inteligência artificial para prever com sucesso estruturas tridimensionais de proteínas complexas, uma tarefa quase impossível antes do método por eles desenvolvido.

Entre os fatores que determinam a estrutura tridimensional de uma proteína, estão as ligações químicas e interações intermoleculares que podem ocorrer entre fragmentos de suas cadeias. Considere a figura a seguir ilustrativa dos casos 1, 2, 3 e 4 envolvendo fragmentos de duas cadeias de uma proteína.



Sobre os casos 1, 2, 3 e 4 indicados, responda:

a) Qual o nome das ligações químicas e/ou interação intermolecular apresentada em cada caso?

b) Considerando que apenas o tipo de ligação ou interação intermolecular determina sua força (e não o tamanho e peso dos fragmentos envolvidos), qual a ordem crescente da força esperada para os casos indicados na figura?

c) Considerando que quanto mais forte a ligação ou interação intermolecular, menor a distância entre os fragmentos e que a proteína da figura tende a formar estruturas aproximadamente cilíndricas, qual dos três formatos aproximados a seguir descreve melhor sua estrutura tridimensional: (1) cilíndrica achatada no centro; (2) cilíndrica achatada nas duas extremidades ou (3) cilíndrica achatada em uma das extremidades? Explique.

Resolução:

a) 1: interações de van der waals (neste caso, dipolo induzido-dipolo induzido); 2: ligação covalente; 3: ligação iônica; 4: ligação de hidrogênio

b) $1 < 4 < 2 < 3$

c) (3) Cilíndrica achatada em uma das extremidades, pois as ligações e interações mais fortes estão em uma das extremidades