

### Avaliação Geral

**Instruções para a avaliação:**

Abaixo, encontra-se a **avaliação** geral do curso. O objetivo é auxiliá-los a fixar os conceitos trabalhados em sala e assim como ir um pouco além. Como vocês têm acesso a livros, a **justificativa adequada é essencial**, mostrando que você entendeu o assunto. Respostas sem justificativa adequada não serão consideradas.

As questões podem ser discutidas em grupo, mas **devem ser respondidas individualmente**.

Para melhor organização, entregar a atividade pelo Google Forms:

<https://forms.gle/qJDvZw7gJN3k9D5HA> (configuração para entrega: fazer login com email @usp.br, anexar até 10 arquivos - mas se possível, entregar em 1 arquivo só -, com tamanho máximo total de 100 MB por pessoa).

**Organize bem as respostas!**

**Data de entrega: até 13/12/2022.**

**Questão 1.** Essa questão se baseia no artigo “As clorofilas”, Streit et al. Ciência Rural, 35(3), 2005. <https://doi.org/10.1590/S0103-84782005000300043>.

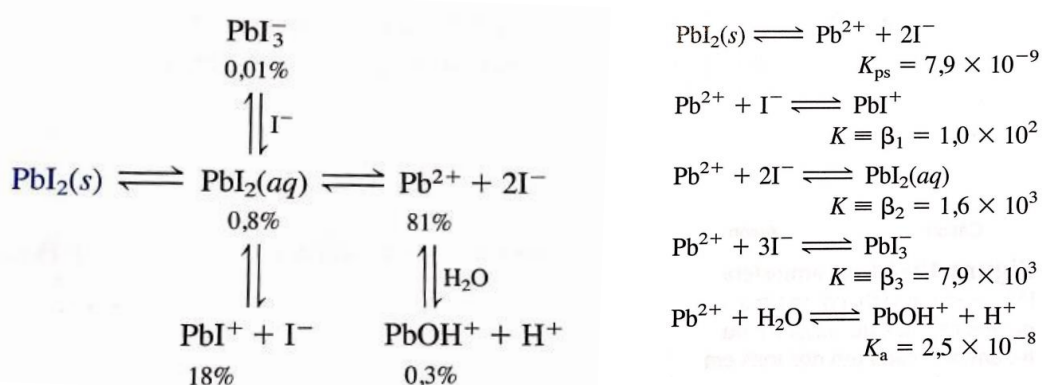
- Explique como a feofitinação (p.752), citada no artigo, se relaciona com equilíbrio ácido-base. Pesquise e dê pelo menos um exemplo do cotidiano.
- Ainda na página 752, há a correlação entre pH e estabilidade térmica da clorofila. Pesquise sobre o assunto e explique a razão.
- Pesquise um exemplo de clorofila (ou seu derivado ou molécula de estrutura bem semelhante) complexada com outro metal. Diga em que contexto ela é encontrada e descreva suas propriedades.

**Questão 2.** Esta questão se baseia na leitura do artigo “Sideróforos: “uma resposta dos microrganismos””, Química Nova, Vol. 25, No. 6B, 1155-1164, 2002. Leia o artigo e responda o que se pede:

- Por que micro-organismos que possuem sideróforos têm maior vantagem evolutiva quando comparados àqueles que não possuem sideróforos?
- Compare os grupos funcionais presentes nos sideróforos e explique a seletividade deles para ferro. Por que, no nível molecular, a afinidade de tais compostos por Fe(III) é maior do que a afinidade por Fe(II)?
- A *Salmonella typhimurim* é uma bactéria que pode desencadear infecções gastrointestinais. Já as bactérias do gênero *Nocardia* podem provocar infecções pulmonares e cutâneas. Suponha que uma cientista, estudando essas bactérias, tenha inoculado ambas no mesmo meio de cultura. Considerando apenas os sideróforos presentes em cada micro-organismo, qual deles terá maior crescimento? Justifique sua resposta com base nos dados fornecidos pelo artigo.

d) A transferrina é uma glicoproteína transportadora de ferro, presente no sangue humano, cuja constante global de formação do complexo é na ordem de  $10^{22}$ . Compare a estabilidade do complexo ferro-transferrina com aquelas fornecidas para os sideróforos mencionados no artigo. Uma pessoa infectada por qualquer um dos micro-organismos mencionados no artigo apresentará maior vantagem na disputa pelo ferro? Justifique. Sugira um melhor mecanismo de defesa do organismo humano para evitar o sequestro de ferro por organismos invasores.

**Questão 3.** O livro “Explorando a Química Analítica”, Daniel C. Harris, LTC, 4ª edição, página 237 mostra que o iodeto de chumbo ( $PbI_2$ ), é pouco solúvel em água, mas ao se solubilizar, forma uma série de espécies químicas diferentes, conforme mostrado na figura abaixo. As porcentagens de cada espécie foram calculadas com base nas constantes de equilíbrio.



- a) Explique esse resultado com foco em: (i) Por que mais de uma espécie pode se formar em solução; (ii) como, usando as constantes, essas porcentagens foram calculadas (obs: acho maldade pedir para vocês calcularem essas porcentagens, mas quem quiser o desafio vamos lá!)
- b) O meio resultante seria ácido ou básico? Justifique. Como se pode estimar o pH final da solução?

**Questão 4.** Sobre a organização periódica de elemento:

a) Um artigo recente intitulado “Nonempirical Definition of the Mendeleev Numbers: Organizing the Chemical Space” Zahed Allahyari e Artem R. Oganov, *J. Phys. Chem. C* **2020**, 124, 43, 23867–23878 (<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcc.0c07857>) foi bastante noticiado na mídia como fazendo uma nova proposta de tabela periódica. Descreva resumidamente qual a proposta dos autores nesse artigo.

b) Escolha uma das tabelas periódicas alternativas à proposta de Mendeleev, diga qual você escolheu e explique no que ela se baseia para organizar os elementos.

**Questão 5.** Sobre orbitais atômicos e ligação química:

a) Defina brevemente um orbital atômico e um orbital molecular.

Agora pesquise o artigo original do Robert Mulliken “Electronic Population Analysis on LCAOMO Molecular Wave Functions. I.”, J. Chem. Phys. 23, p. 1833, **1955**. (DOI: 10.1063/1.1740588) para responder aos itens (b) a (e).

**b)** Explique a passagem da equação (1) para a (2). O que representa a equação (2)?

**c)** Explique a passagem da equação (2) para (3). Explique o que são os termos da equação (3) citada pelo autor (*net atomic population* e *overlap population*).

**d)** A equação (3) se refere a um orbital ligante ou anti-ligante? Justifique e mostre como seria a fórmula para o outro orbital.

**Questão 6.** Ao procurar músicas da banda U2, você encontrou por engano um artigo sobre a ligação na molécula de  $U_2$ . (Knecht, E; Jensen, H.J.A.; Saue, T. “Relativistic quantum chemical calculations show that the uranium molecule  $U_2$  has a quadruple bond”, Nature Chemistry, 11, p.40, 2019.

**a)** Explique o conceito de EBO citado no artigo.

**b)** Quais são os tipos de ligações (orbitais) responsáveis por essa ligação quádrupla?

**Questão 7.** O grupo BN é isoletetrônico ao grupo CC, sugerindo que pode haver compostos análogos entre estes pares de átomos. Entretanto, o composto  $H_3NBH_3$  é sólido à temperatura ambiente enquanto seu similar, o etano,  $H_3CCH_3$  é um gás que condensa a  $-89^\circ C$ . Explique esse fato.

**Questão 8.** Sobre o carbono e o silício, responda:

**a)** O composto trimetilamina  $[N(CH_3)_3]$  tem geometria piramidal, enquanto o trisililamina  $[N(SiH_3)_3]$  tem geometria trigonal plana. Explique essa diferença.

**b)** Quando se discute possibilidade de vida em outros planetas, a questão sobre possíveis bioquímicas alternativas sempre aparece. Especula-se muito a possibilidade de vida existir baseada em outro elemento diferente do carbono e em solvente não aquoso. Apesar de não sabermos se a vida de fato funcionaria em outras condições, podemos ter algumas dicas baseadas na química desses compostos.

O silício é sempre um átomo citado para substituir o carbono em biomoléculas, devido às suas propriedades semelhantes. Muitos pesquisadores, entretanto, acham que esse

elemento não conseguiria ter a mesma versatilidade química do carbono para sustentar vida. Pesquise sobre as propriedades do átomo de silício e sua capacidade de formar ligações químicas e diga quais as suas desvantagens para sustentar biomoléculas semelhantes à da vida que conhecemos.

**Questão 9.** Sobre as ligações metálicas, explique o significado da frase a seguir, com base no conteúdo visto no curso sobre as ligações formadas. Como essas ligações diferem das demais?

“A baixa direcionalidade das ligações que os átomos metálicos podem formar justifica a grande ocorrência de polimorfismo, que é a capacidade de adotar diferentes formas cristalinas sob diferentes condições de temperatura e pressão”