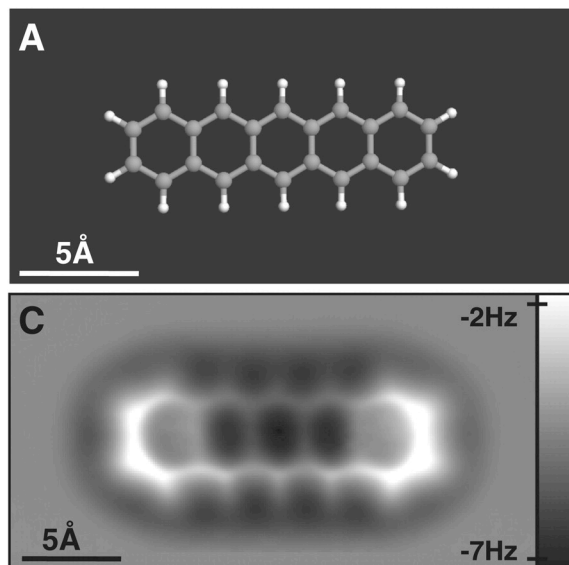
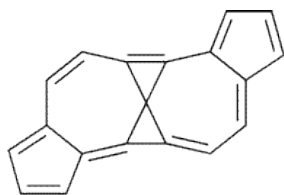




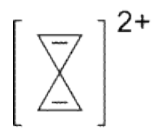
- (1) A imagem da molécula de pentaceno foi recentemente obtida através de microscopia de força atômica (AFM). (Ver DOI: 10.1126/science.1176210). Nesta técnica, a imagem é obtida por uma sonda de dimensões moleculares sobre a molécula que “sente” os elétrons do sistema observado. Na imagem, as bordas estão mais brilhantes. Explique usando Hückel. (1,0 ponto)



- (2) Os professores Rodrigo e Pierre propuseram um hidrocarboneto cujo átomo central, é tetravalente e plano, o que viola o conceito de que todo carbono tetravalente e tetracoordenado deva ser tetraédrico (Estrutura IV) (*J. Am. Chem. Soc.*, **2005**, 127 (24), 8680–8685, DOI: 10.1021/ja042971a). A concepção deste sistema foi baseada no dicátion do fragmento spirociclopentadieno (Estrutura Ia). Calcule o diagrama de orbitais moleculares, empregando Hückel, explicando como essa planarização seria possível (2,0 pontos).

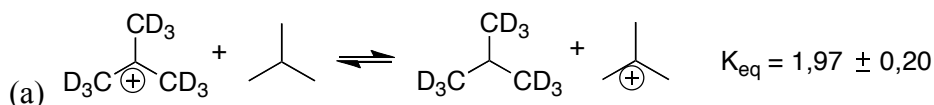


IV

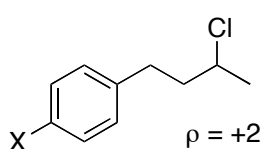
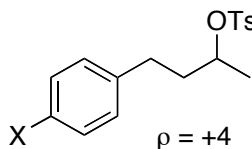


Ia

- (3) Explique: (4,0 pontos)



- (b) Os resultados das solvólises abaixo



(aqui o correto é $\rho = -4$ e $\rho = -2$)

(4) O Prof. Lee, prêmio Nobel que esteve recentemente no IQ-UFRJ falou sobre qual tema em seu seminário? Comente a respeito. (1,0 ponto)

(5) Considere os dados cinéticos abaixo (3,0 pontos)

t (s)	T = 35°C	T = 40°C	T = 45°C	T = 50°C
	[R] mol/L ⁻¹	[R] mol/L ⁻¹	[R] mol/L ⁻¹	[R] mol/L ⁻¹
0	0,200	0,200	0,200	0,200
15	0,183	0,180	0,178	0,175
30	0,167	0,162	0,158	0,153
45	0,152	0,146	0,140	0,134
60	0,139	0,132	0,125	0,117
75	0,127	0,119	0,111	0,103
90	0,116	0,107	0,099	0,090
105	0,106	0,097	0,088	0,079
120	0,096	0,087	0,078	0,069
135	0,088	0,079	0,069	0,060

- (a) Determine a expressão para a lei cinética
(b) Determine as constantes de velocidade para a reação em cada uma das temperaturas.
(c) Determine ΔH^\ddagger , ΔS^\ddagger e ΔG^\ddagger