

# Lista de Exercícios 1 - Módulos 1 a 5

## QUI022 - Química Orgânica

Professor: Lucas Raposo Carvalho  
Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI)

Segundo semestre de 2024

### Instruções

- Conforme combinado em sala de aula e de acordo com o material enviado no SIGAA, o envio dessa lista resolvida deverá ser feito até o dia **17/09/2024**;
- As questões da seção **Problemas Desafiadores NÃO** precisam ser entregues resolvidas, pois servem de aprofundamento de conteúdo.
- Essa lista poderá ser entregue fisicamente ou por e-mail (endereço de e-mail: [lucasraposo@unifei.edu.br](mailto:lucasraposo@unifei.edu.br)).

1. Para cada molécula representada a seguir, faça o seguinte:

- Desenhe a estrutura de Lewis considerando os pares de elétrons não-ligantes;
- Indique a carga formal de cada átomo quando ela for diferente de zero.

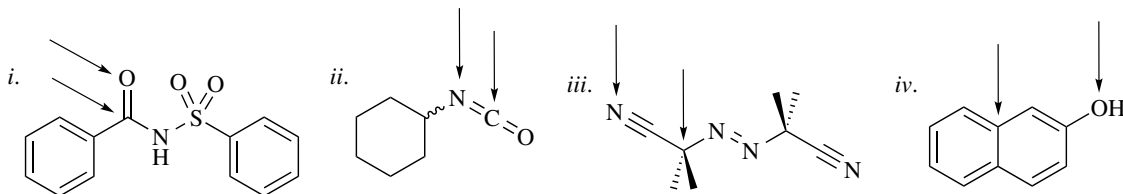
---

*i.*  $\text{SOCl}_2$    *ii.*  $\text{HNO}_3$    *iii.*  $\text{H}_3\text{PO}_4$    *iv.*  $\text{H}_2\text{O}_2$    *v.*  $\text{O}_3$

---

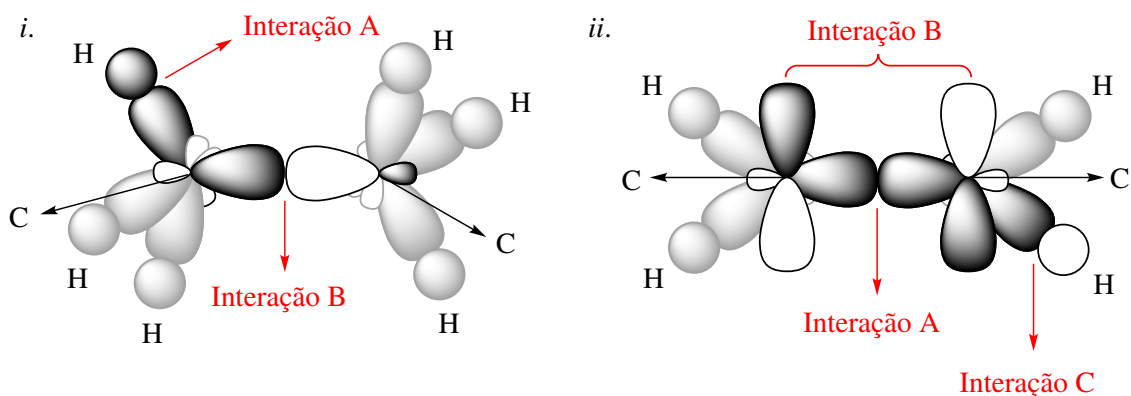
2. Para cada molécula representada a seguir, faça o seguinte:

- Adicione pares de elétrons não-ligantes de modo que cada átomo possua octeto completo;
- Indique a hibridação e geometria dos átomos assinalados com uma seta.

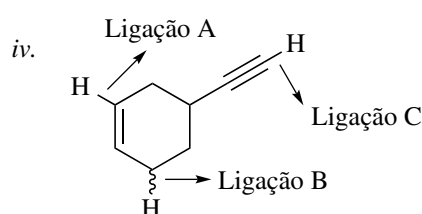
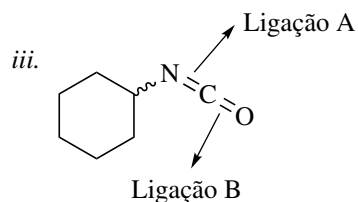
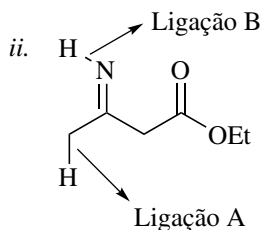
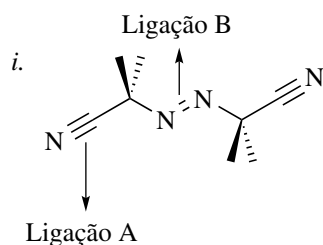


3. Para cada interação orbitalar a seguir, faça o que se pede. Os átomos de cada ligação estão representados pelos seus símbolos. Os orbitais a serem considerados estão em preto.

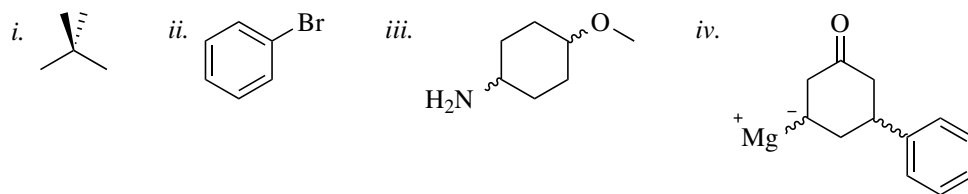
- Indique se a interação será frontal ou lateral;
- Indique se a interação será construtiva ou destrutiva;
- Indique se a ligação formada é do tipo  $\sigma$  ou  $\pi$  e se o orbital molecular é ligante ou antiligante. Desenhe a forma aproximada do orbital molecular.



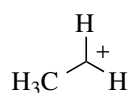
4. Para cada composto a seguir, ordene o comprimento das ligações destacadas, em ordem crescente. Justifique a ordenação com base na hibridação dos átomos e seus valores de eletronegatividade ( $\chi$ ).



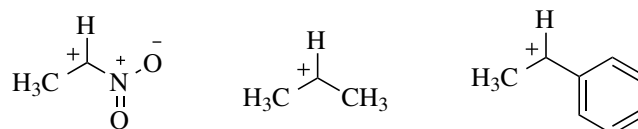
5. Para cada composto a seguir, adicione pares de elétrons não-ligantes e identifique cargas parciais positivas ( $\delta^+$ ) ou negativas ( $\delta^-$ ) de todas as ligações químicas, se for o caso. Para cada ligação polar, identifique a direção do vetor momento de dipolo ( $\vec{\mu}$ ).



6. Considere a estrutura do carbocátion etílico:



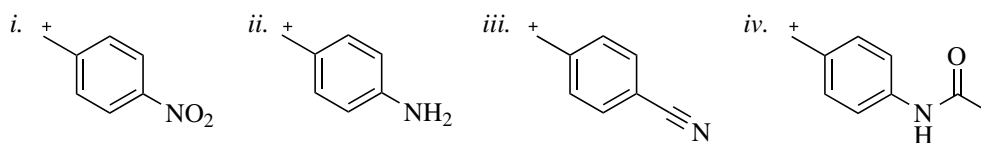
- Compare a estabilidade desse carbocátion com a do metílico ( $\text{H}_3\text{C}^+$ ) e descreva os fatores que contribuem na diferença de estabilidade;
- Considere os substituintes nitro ( $-\text{NO}_2$ ), metil ( $-\text{CH}_3$ ) e fenil ( $-\text{C}_6\text{H}_5$ ) diretamente ligados ao carbocátion, conforme as estruturas a seguir:



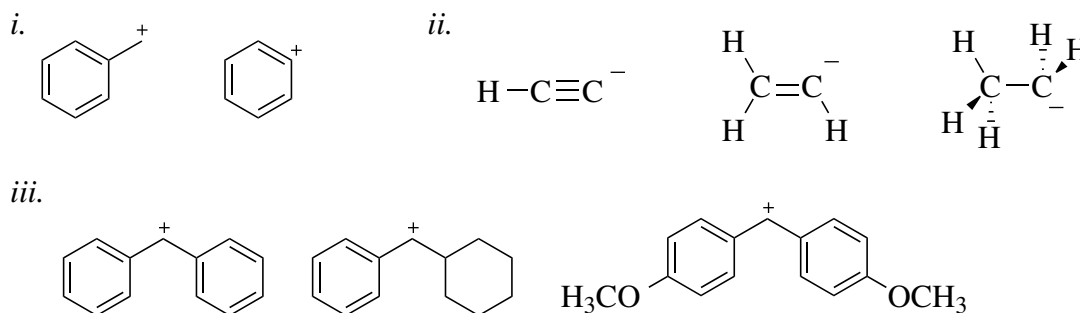
Ordene os três carbocátions acima e o etílico, em ordem crescente de estabilidade, e justifique a ordenação;

- Caso os compostos carbocatiônicos mencionados até então fossem trocados pelos seus equivalentes radicalares, como a ordem de estabilidade estabelecida no item b seria alterada?

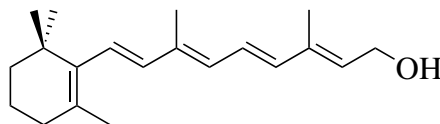
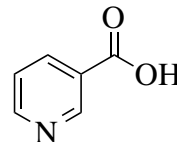
7. Ordene os carbocátions abaixo em ordem crescente de estabilidade e justifique a ordenação.



8. Ordene os seguintes conjuntos de espécies químicas em ordem crescente de estabilidade e justifique a ordenação.

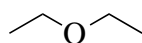


9. Indique as porções hidrofóbicas e hidrofílicas da vitamina A e da vitamina B<sub>3</sub> (niacina ou ácido nicotínico). Ordene os compostos em ordem crescente de solubilidade em água e justifique a ordenação.

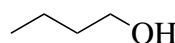
**Vitamina A****Vitamina B<sub>3</sub>**

(niacina ou  
ácido nicotínico)

10. O fluoreto de hidrogênio (HF) possui momento dipolo ( $\vec{\mu}$ ) igual a 1,83 D e seu ponto de ebulição é 19,34 °C. O fluoreto de etila (CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>F) possui um momento dipolo quase idêntico e maior massa molar, mas seu ponto de ebulição é -37,7 °C. Justifique a diferença entre os pontos de ebulição.
11. O éter etílico e o butan-1-ol são isômeros e estão representados abaixo.



Etoxietano  
(dietil éter  
ou éter etílico)

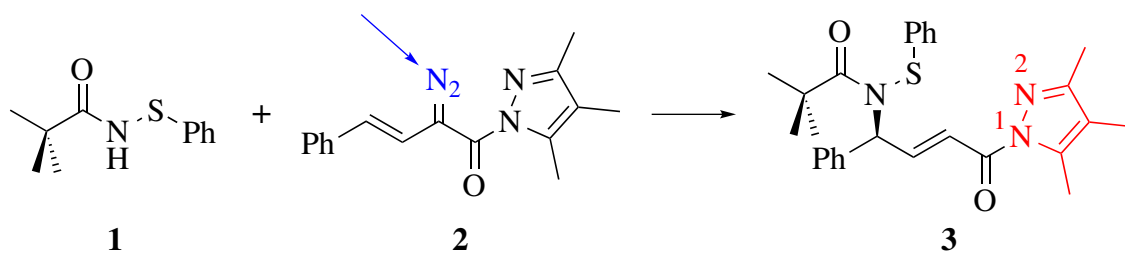
**Butan-1-ol**

Sabe-se que, embora os pontos de ebulição de ambos sejam significativamente diferentes, a solubilidade de ambos em água é similar. Justifique esse comportamento.

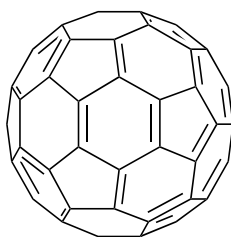
Composto	Ponto de ebulição (°C)	Solubilidade (g/100 g de H <sub>2</sub> O, 25 °C)
Etoxietano	34,6	6,05
Butan-1-ol	117-118	7,4

## Problemas desafiadores

- D1. A reação abaixo envolve a reação entre uma sulfenamida (**1**) e um composto diazovínílico (**2**), unindo ambos os compostos por uma ligação C-N (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, e202414712, DOI: 10.1002/anie.202414712).

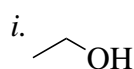


- a. Adicione pares de elétrons em todos os átomos de modo que fiquem com o octeto completo;
  - b. Determine a hibridação dos átomos de nitrogênio do grupo azeno ( $N_2$ ), destacado com uma seta;
  - c. Sabe-se que o átomo de nitrogênio N1 possui ângulo de ligação de  $120^\circ$ , indicando que possui uma hibridação  $sp^2$ . Considerando a estrutura, essa hibridação era esperada?
  - d. Desenhe os orbitais de N1, assumindo a hibridação  $sp^2$ , e indique em qual tipo de orbital o par de elétrons não-ligante estará.
  - e. Quais as vantagens, do ponto de vista energético, envolvidas na hibridação de N1 ser  $sp^2$  e não  $sp^3$ ?
- D2.** Os fulerenos são nanomoléculas superaromáticas, simétricas e compostas por dezenas de átomos de carbono. O representante mais estável e conhecido da família dos fulerenos é o  $C_{60}$ , cuja estrutura é apresentada abaixo.

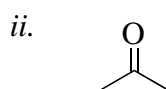
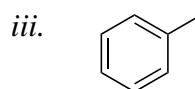
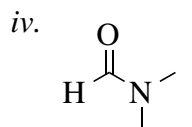
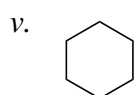


- a. Indique a hibridização dos átomos de carbono do fullereno;

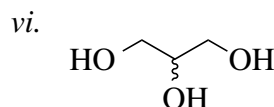
Devido a sua forma tridimensional, ligações insaturadas e estrutura eletrônica, os fulerenos apresentam propriedades físicas e químicas únicas, que podem ser exploradas em várias áreas da bioquímica e da medicina. A seguir, são representadas as fórmulas estruturais de alguns compostos que são utilizados como solventes em laboratório de química orgânica.



Etanol

Propan-2-ona  
(acetona)Metilbenzeno  
(tolueno)*N,N*-dimetil-  
formamida  
(DMF)

Cicloexano



Propano-1,2,3-triol

- b. Suponha que você foi encarregado de solubilizar completamente o fulereno para ser utilizado em uma reação química. Dentre os compostos apresentados acima, cite dois que seriam mais eficientes neste processo e justifique;
- c. Represente a formação de ligação de hidrogênio entre as moléculas de etanol e propan-2-ona;
- d. Qual dos solventes apresentados é capaz de realizar ligações de hidrogênio intramoleculares? Justifique sua resposta e represente as ligações;
- e. Represente três formas canônicas para a DMF. Quando for o caso, indique as cargas formais dos átomos carregados. Ordene as formas canônicas em ordem crescente de estabilidade e justifique sua resposta;
- f. O número de onda ( $\bar{\nu}$ ) relativo ao estiramento da ligação C=O da DMF, observável por uma análise de espectroscopia no infravermelho (FTIR), é igual a  $1675\text{ cm}^{-1}$ . Em contrapartida, o da ligação C=O da acetona é igual a  $1715\text{ cm}^{-1}$ . Como você justifica essa diferença?