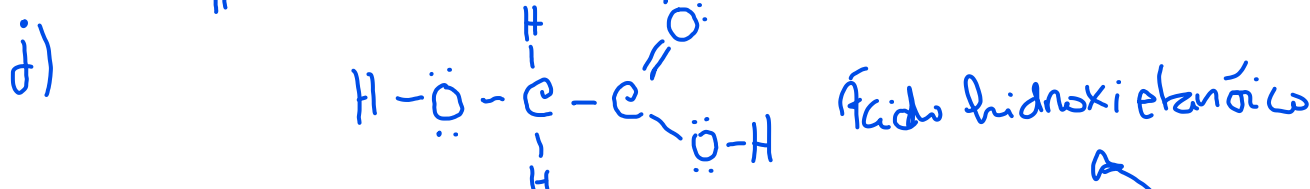
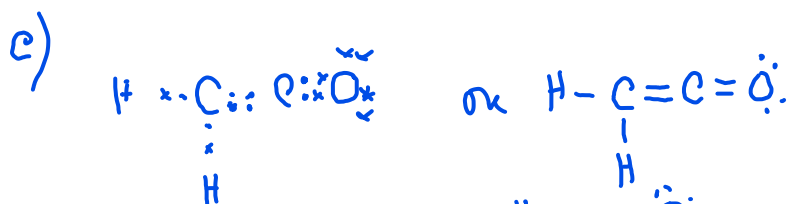


Resolução de exercícios de Química Orgânica:

Estrutura e Ligação

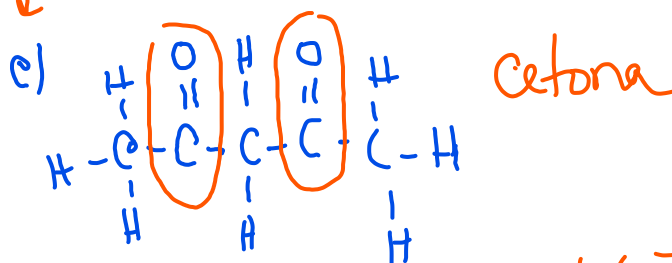
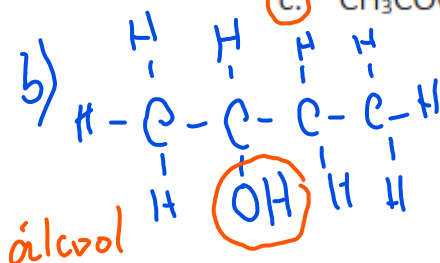
1. Escreva a estrutura de Lewis para cada uma das seguintes estruturas/espécies:

- | | |
|------------------------------------|---------------------------|
| a. ClF | f. MgBr ₂ |
| b. BrCN | g. NH ₄ Cl |
| c. CH ₂ O | h. CCl ₄ |
| d. CH ₃ NH ₂ | i. CH ₃ OH |
| e. CH ₃ F | j. OHCH ₂ COOH |



2. Represente a fórmula desenvolvida plana das seguintes estruturas:

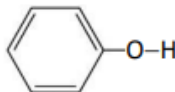
- | | |
|--|---|
| a. CH ₃ CN | d. CH ₂ BrCHBr ₂ |
| b. CH ₃ CH(OH)CH ₂ CH ₃ | e. OHCH ₂ COOH |
| c. CH ₃ COCH ₂ COCH ₃ | f. CH ₂ CHCONH ₂ (acrilamida) |



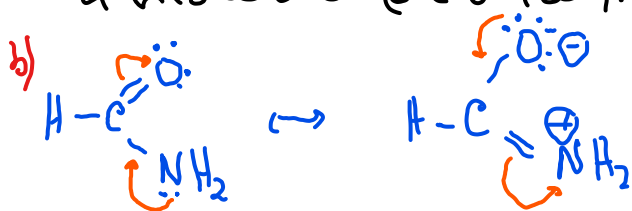
2-butanol

NOTA: não é necessário mostrar elétrons não-ligantes

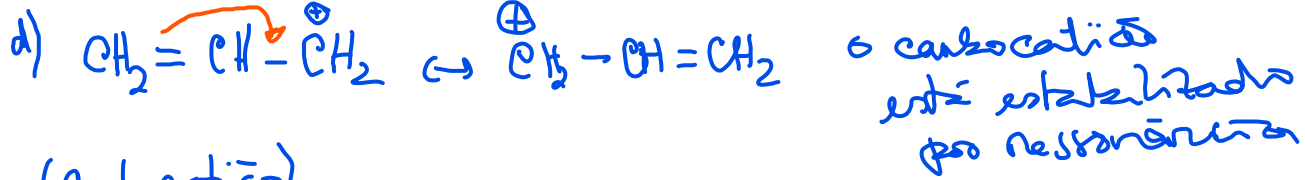
3. Escreva as estruturas de ressonância para cada uma das seguintes espécies e indique a forma mesômera de cada um.

- | | |
|---|--|
| a. CH ₂ CHNH ⁺ | e. ⁺ CH ₂ -O-CH ₃ |
| b. HCONH ₂ | f. CH ₂ =CH-Cl |
| c. CH ₃ CONH ₂ | g. ⁺ CH=CH-Cl |
| d. CH ₂ =CH-CH ₂ ⁺ | h.  |

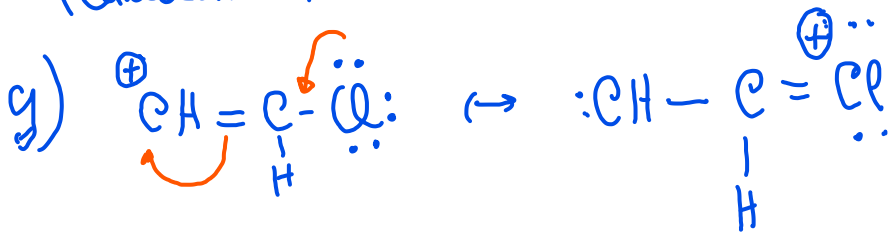
ao longo da estrutura, que estabilizam a molécula (ou o ião).



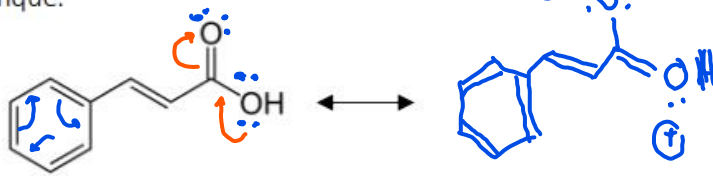
2 formas mesômeras (ou formas limites). Todas as amidas são estabilizadas por ressonância eletrônica.



(Carbocátion)

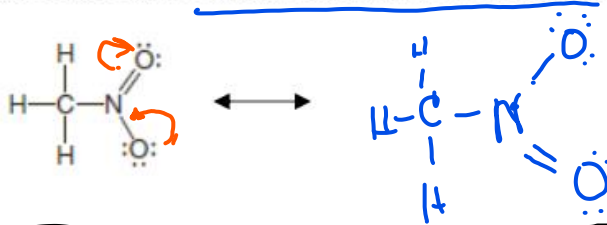


- 5) Considere o ácido cinâmico (representado pela figura). Indique se tem estabilização por ressonância. Justifique.

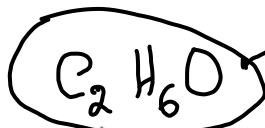


podemos não mostrar com carga,

- 6) O nitrometano é um composto presente na composição de alguns pesticidas. A partir da estrutura em baixo, desenhe uma segunda estrutura de ressonância.

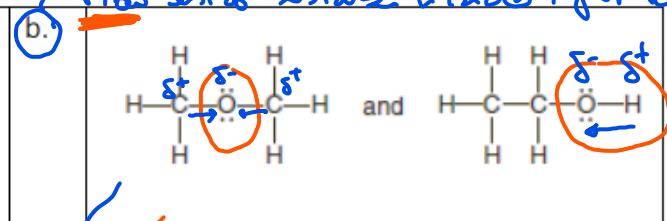
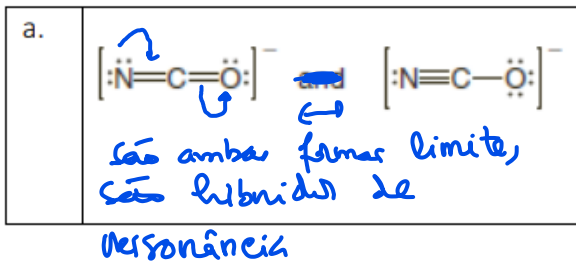


pq elas não são efetivas



tem a mesma fórmula molecular, os mesmos átomos, mas ligados de forma $\neq$ isômeros de função

7. Identifique se os seguintes pares representam estruturas de ressonância.



Éter (R-O-R)
Éter dimetílico

Álcool (R-OH)
Etanol

só representam estruturas de ressonância em (a), são a mesma molécula, mas estabilizada por deslocalização eletrônica. Em b, são moléculas $\neq$.

Molécula apolar: porque os vetores de ambos os dipolos se anulam.

Forças intermoleculares éter: Forças de London.

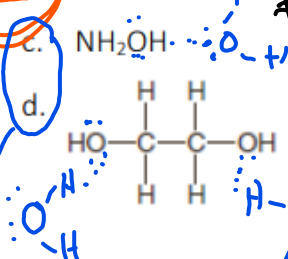
(Dipolo instantâneo - dipolo induzido)

→ pontes de hidrogênio do éter é menor² do que o do álcool, pq tem forças intermoleculares + fracas.

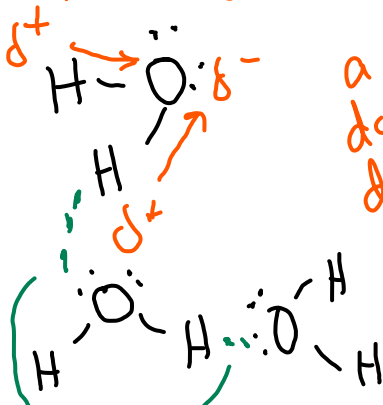
"Semelhante dissolve semelhante": um composto pó e miscível com outro se tiver o mesmo tipo de forças intermoleculares nas substâncias puras, ou, eventualmente, podem formar forças intermoleculares igualmente fortes quando misturados.

8. Quais dos seguintes compostos são solúveis em água? Justifique.

- a. CH_4 Molécula apolar, não é solúvel em água
- b. KBr composto iônico, é solúvel em água $\text{K}^+(\text{aq}) + \text{Br}^-(\text{aq})$



Na água as forças intermoleculares são de que tipo:



a água é uma molécula polar. Por isso, na pior das hipóteses, pode ter ligações intermoleculares do tipo "dipolo permanente - dipolo permanente".

mas, na verdade, tem ainda ligações mais fortes, do tipo "Ponte de hidrogênio".

ligação ou ponte de H: estabelecem-se entre o H ligado a um átomo de N, O ou F e outro átomo de N, O ou F.

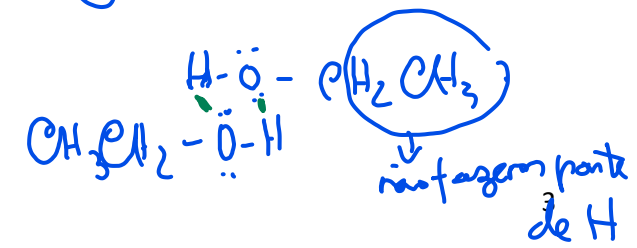
Se solúveis na água todos os compostos iônicos, polares, ou que fazem pontes de H.

9. Quais dos seguintes pares formam soluções?
- a. Benzeno (C_6H_6) e Hexano (C_6H_{14})
 - b. NaCl e Hexano (C_6H_{14})
 - c. H_2O e CCl_4
 - d. Etanol ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$) e acetona (CH_3COCH_3)
 - e. CH_3Br e H_2O
 - f. C_5H_{12} e Hexano (C_6H_{14})

(a) e (f) $\rightarrow$ hidrocarbonetos $\rightarrow$ moléculas apolares. Por isso, são total miscíveis entre si, pq semelhante dissolve semelhante, formam-se as mesmas forças intermoleculares que as existentes nas substâncias puras: "forças de London" (dipolo instantâneo - dipolo induzido).

c) $\text{H}_2\text{O} \rightarrow$ polar $\rightarrow$ pontes de hidrogênio
 $\text{CCl}_4 \rightarrow$ apolar $\rightarrow$ Forças London

d) Etanol $\rightarrow$ molécula polar $\rightarrow$ e faz pontes de H



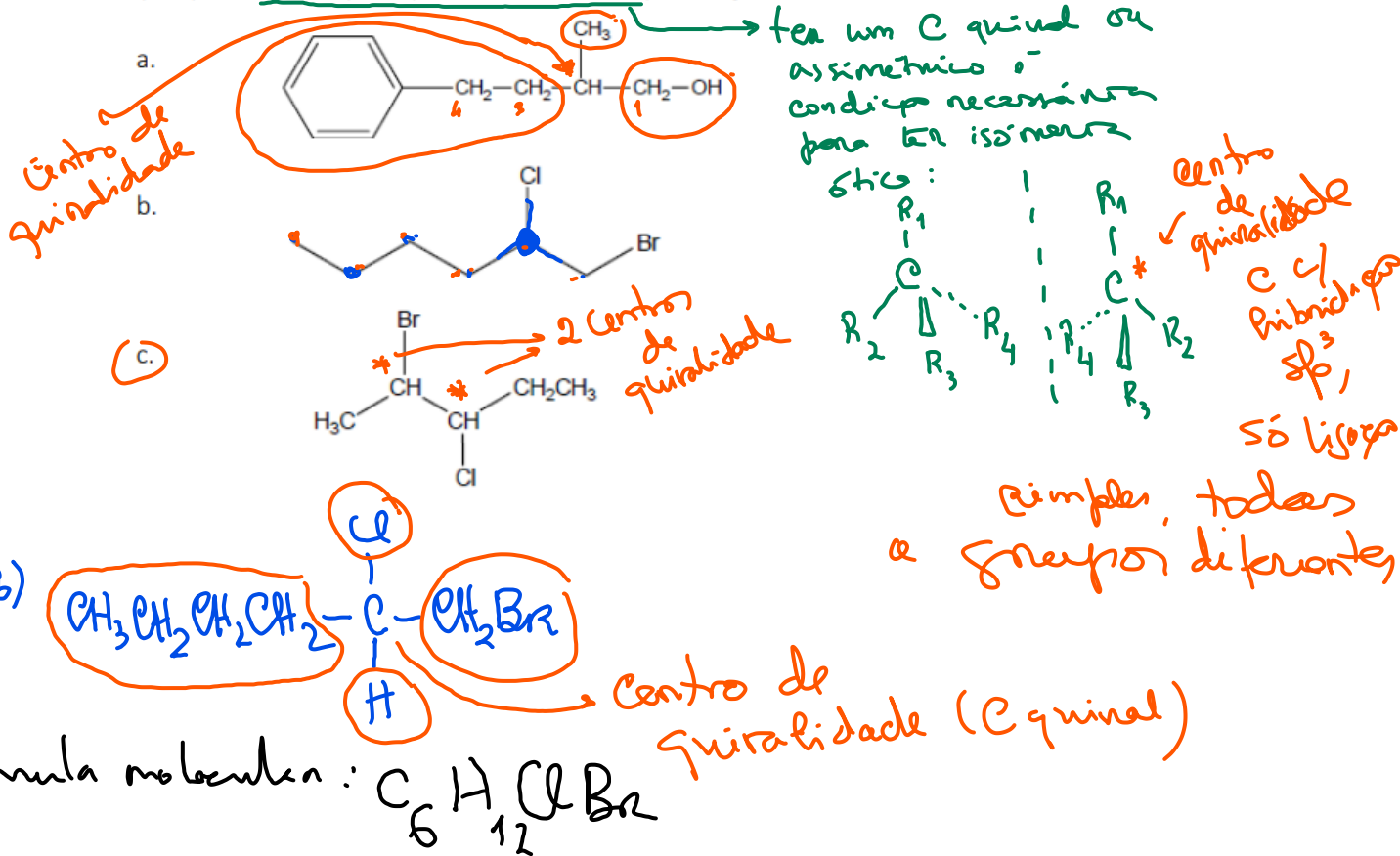
Acetona $\rightarrow$ é polar $\rightarrow$ Funções intermoleculares são do tipo dipolo permanente - dipolo permanente. Neste caso, o etanol e a acetona não se misturam pois são ambas moléculas polares.

Isomeria

Propanona

não fazem parte de H

1. Indique qual o centro quiral (carbono assimétrico) das seguintes moléculas.



2. Indique quais dos seguintes compostos apresentam isomeria geométrica (cis-trans). Represente-os.

- 1-Buteno
- 2-Buteno
- 1,1-Dicloroeteno
- 1,2-Dicloroeteno
- 2-Metil-2-buteno
- 1-Penteno
- 2-Penteno
- 1-Cloropropeno
- 1-Cloro-2-metil-2-buteno

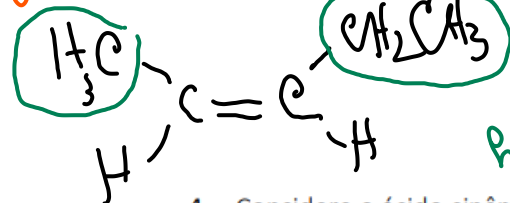
Podemos ter isomeria geométrica ou cis-trans, se tivermos uma ligação dupla, por isso 2 carbonos C/ hibridação sp^2 , C/ os grupos ligados a cada C $\neq$ entre si:



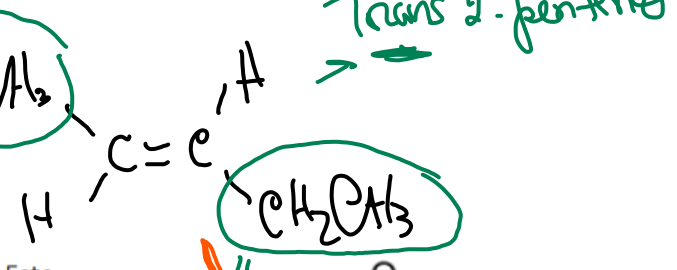
Tanto isomeria cis-trans, por a ligação dupla (composta por uma ligação σ e uma ligação π) não pode rodar.



g) 2-Penteno

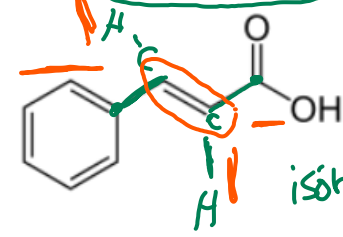


é diferente de
há isomeria
cis-trans



Trans 2-penteno

4. Considere o ácido cinâmico (representado pela figura). Este composto tem isomeria cis-trans? A que se deve este tipo de isomeria?

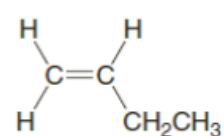


isômero trans

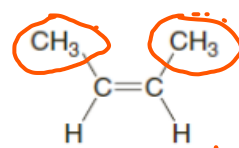
Cis 2-penteno

Este tipo de isomeria ocorre por haver impossibilidade de rotação de ligação dupla

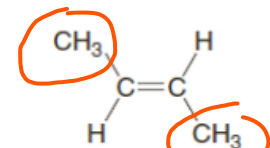
5. Indique as relações de isomeria entre os seguintes compostos:



1-Buteno (X)



Cis 2-buteno (Y)



trans 2-buteno (Z)

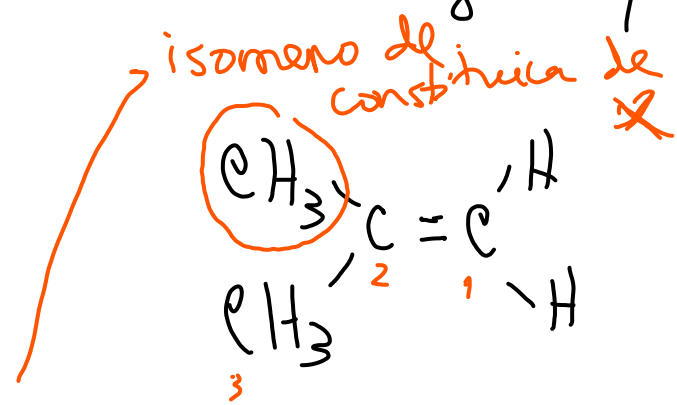
→ Fórmula molecular C_4H_8

alcenos

- a. XeY Isômeros de constituição
- b. XeZ " de constituição
- c. YeZ Isomeria geométrica (ou cis-trans)
- d. Explique o que origina a isomeria verificada em c.

diferem na ordem das ligações (posição ≠ p/ a dupla ligação)

Esta isomeria é causada pelo facto de a ligação dupla não poder rodar e de os grupos ligados a cada C serem diferentes.

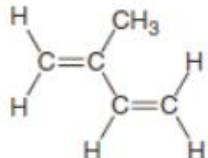
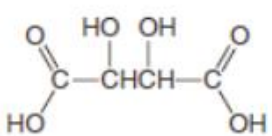
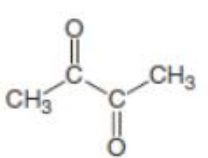
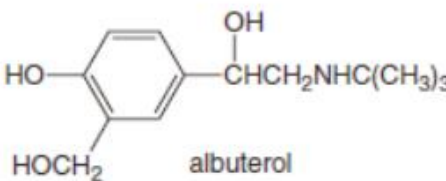
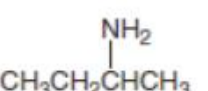
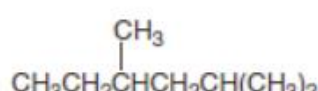
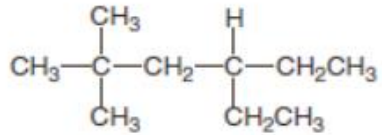
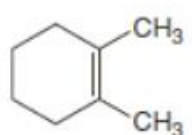


2-Metil-1-propeno

este não tem isomeria cis-trans

6. Indique quais dos seguintes compostos:

- Apresentam isomeria geométrica (*cis-trans*).
- Apresentam 1 (ou mais) carbonos assimétricos.
- Identifique, se possível, um carbono primário, secundário, terciário, quaternário.

a.	 isoprene (emitted by plants)	b.	 tartaric acid (from grapes)
c.	 butanedione (component of butter flavor)	d.	 albuterol
e.		f.	
g.		h.	

Polarização de ligações

1. Com base no padrão de eletronegatividade dado pela tabela periódica, ordene os seguintes grupos por ordem crescente deste factor.

a. Li, Na, H

b. O, C, Be

c. Cl, I, F

d. B, O, N

2. Com base na eletronegatividade dos elementos, classifique as ligações como polar covalente, não polar e iónica.

a. Cl₂

b. MgO

c. HCl

d. NaCl

e. NH₃

Increasing electronegativity →

1A	2A									3A	4A	5A	6A	7A	8A
H 2.1										B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0	
Li 1.0	Be 1.5									Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0	
Na 0.9	Mg 1.2									Ga 1.6	Ge 1.8	As 2.0	Se 2.4	Br 2.8	
K 0.8	Ca 1.0									In 1.7	Sn 1.8	Sb 1.9	Te 2.1	I 2.5	
Rb 0.8	Sr 1.0														

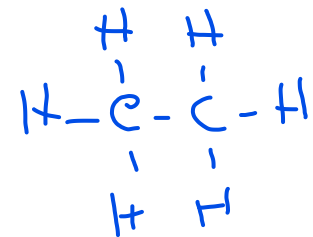
↑ Increasing electronegativity

Nos hidrocarbonetos
temo ligação C-H, essa
ligação não é
considerada
um dipolo p^ro
a Δ de eletronega-
tividades $< 0,5$

$$2,5 - 2,1 = 0,4 < 0,5$$

Diferença de eletronegatividade e tipos de ligação formadas:

Electronegativity Difference	Bond Type	Electron Sharing
Less than 0.5 units	Nonpolar	Electrons are equally shared.
0.5-1.9 units	Polar covalent	Electrons are unequally shared; they are pulled towards the more electronegative element.
Greater than 1.9 units	Ionic	Electrons are transferred from the less electronegative element to the more electronegative element.



Não tem
ligação
polarizada
é dipolar

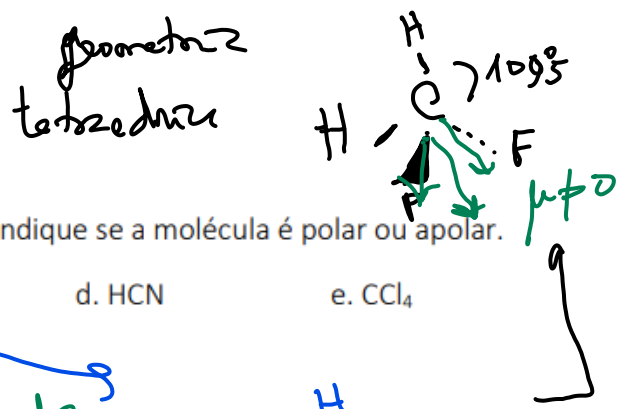
c) HCl

$$\Delta \text{eletronegatividade} = 3 - 2,1 = 0,9 > 0,5$$

molécula polar

d) NaCl

$$3,0 - 0,9 = 2,1 > 1,9 \Rightarrow \text{ligação iónica}$$



4. Identifique as ligações polares em cada molécula e indique se a molécula é polar ou apolar.

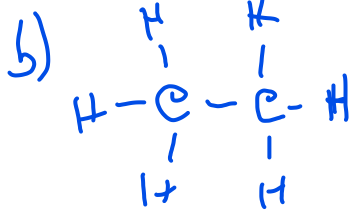
a. HCl

b. C_2H_6

c. CH_2F_2

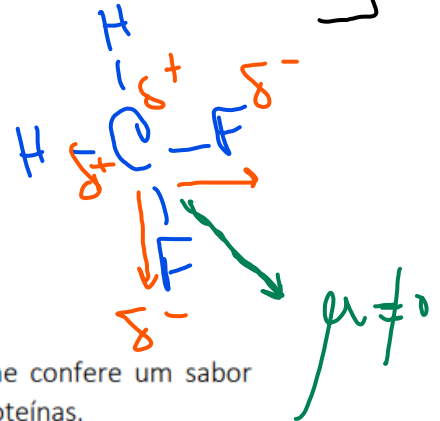
d. HCN

e. CCl_4

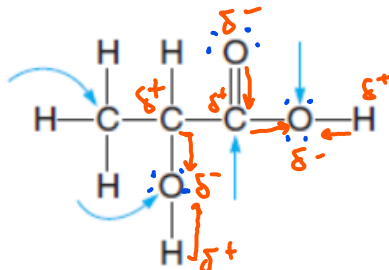


$\mu = 0$, pois não há polaridade na ligação C-H

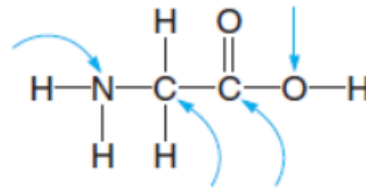
Molécula polar



7. O ácido láctico é um composto presente no soro do leite, o que lhe confere um sabor característico. Por sua vez, a glicina encontra-se na constituição das proteínas.



Ácido láctico



Glicina

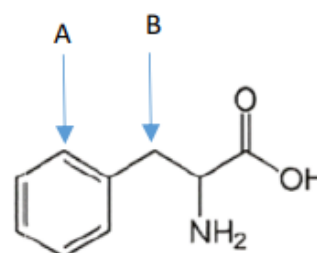
- Para ambas as moléculas, desenhe os pares de elétrons não ligantes.
- Identifique todas as ligações polares, representando o tipo de carga parcial.
- Estas moléculas são polares ou não polares?

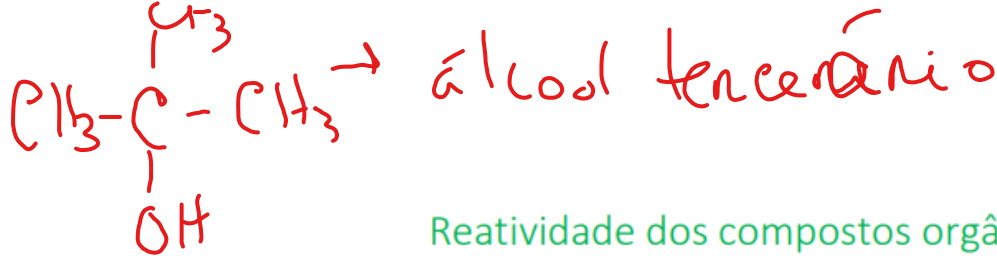
São ambas moléculas polares, pois têm várias ligações polares, mas que não há "anulação" dos vários vetores. Tem momento dipolar $\neq 0$

$\mu \neq 0$

8. Considere a estrutura da figura.

- Indique o nome dos grupos funcionais existentes.
- Indique uma ligação polarizada, e represente as cargas associadas.
- Indique a hibridação das orbitais atômicas dos carbonos assinalados.
- Indique quais as orbitais moleculares que se formam nos carbonos assinalados.



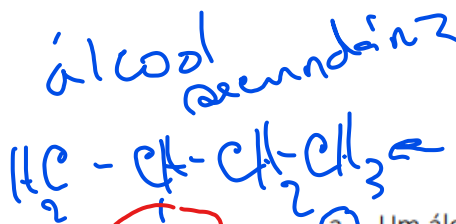
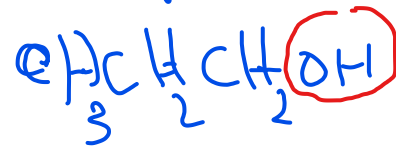


Reatividade dos compostos orgânicos

1. Considere os seguintes álcoois e indique:

		P.eb. (°C) (1 atm)
i	Propanol	97.2
ii	1,2-Propanodiol	187
iii	2-Butanol	99.5

álcool primário

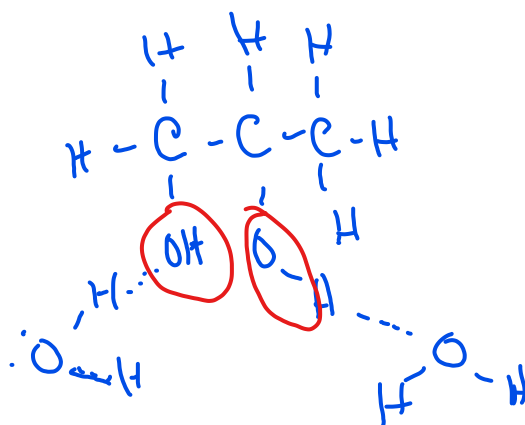


até tem p.e. > p.e. H₂O

- Um álcool primário (i)
- Um álcool secundário (iii)
- Qual dos álcoois deverá ter maior solubilidade em água? Justifique.
- Explique a diferença no valor de ponto de ebulição dos álcoois i) e ii)

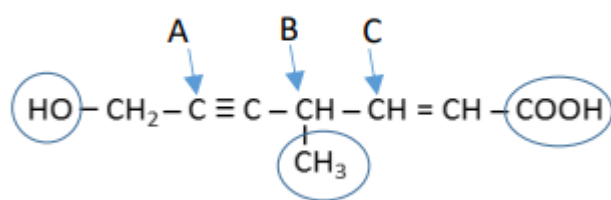
menor volátil

c) Um álcool, é solúvel em água p^o estabelece pontes de hidrogénio com as moléculas da água. Ora, no álcool (ii) → 1,2-propanodiol, pelo facto de termos dois grupos (OH), podemos estabelecer maior n^o de ligações de H, por isso, há ligação mais forte com a água ⇒ ⊕ solúvel em água.



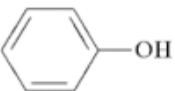
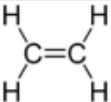
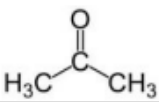
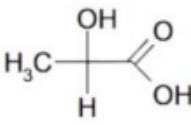
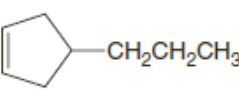
d) o di-álcool tem um ponto de ebulição maior p^o tem forças intermoleculares ⊕ fortes, estabelecidas por 2 pontes de H.

Exercícios Globais



- d. Indique a hibridação das orbitais atómicas dos carbonos assinalados, A, B, C
- e. Indique quais as orbitais moleculares que se formam nas ligações que envolvem estes carbonos.
- f. Identifique os grupos substituintes marcados com um círculo.
- g. Diga se apresenta deslocalização eletrónica e em caso afirmativo represente uma forma limite (recorra ao uso de setas).

6. Considere a Tabela e responda as seguintes questões:

	Estruturas	Tipo/grupo funcional
I		
ii		
iii		
iv		
V		

- Complete a coluna da direita da tabela.
- Indique a hibridação das orbitais atómicas do carbono no composto ii)
- Indique quais as orbitais moleculares que se formam em ii)
- Indique um composto que contenha ligações polarizadas, e indique a referida ligação.
- ~~Indique uma reacção de adição, qual o tipo de composto formado e a partícula envolvida.~~
- Represente um isómero de constituição de iii.
- Para a molécula i) que apresenta a deslocalização eletrónica, represente as formas limite.
- Indique as interações intermoleculares que se estabelecem numa substância constituída por iii, justifique.