

## Lista de Exercícios: Fundamentos de Química Orgânica e Mecanismos (Unidade 1)

### Bloco 1: Estrutura, Eletronegatividade e Carga Formal

1. Calcule a carga formal de cada átomo (exceto hidrogênio) nas seguintes espécies químicas:
  - a) Íon hidrônio ( $H_3O^+$ )
  - b) Íon hidroxila ( $OH^-$ )
  - c) Ânion metóxido ( $CH_3O^-$ )
2. Com base na tabela de eletronegatividade, indique a direção do momento dipolar (usando a notação de vetor  $\rightarrow$ ) para as seguintes ligações:
  - a) C - F
  - b) C - O
  - c) C - N
3. O fluormetano ( $CH_3F$ ) e o metanol ( $CH_3OH$ ) apresentam ligações covalentes polares. Qual das duas moléculas você espera que tenha o maior momento dipolar total? Justifique com base na geometria e na eletronegatividade.
4. Desenhe a estrutura de Lewis para o ácido nítrico ( $HNO_3$ ) e determine a carga formal do átomo de nitrogênio e dos átomos de oxigênio.
5. Por que a molécula de tetracloreto de carbono ( $CCl_4$ ) é considerada apolar, mesmo possuindo quatro ligações C-Cl altamente polares?

### Bloco 2: Ácidos e Bases de Brønsted-Lowry

6. Identifique o ácido, a base, o ácido conjugado e a base conjugada na seguinte reação:  $NH_3 + H_2O \rightleftharpoons NH_4^+ + OH^-$
7. O pKa do ácido acético ( $CH_3COOH$ ) é 4,76, enquanto o pKa do ácido trifluoroacético ( $CF_3COOH$ ) é 0,23. Qual é o ácido mais forte? Explique esse fenômeno com base no efeito indutivo.

8. Escreva a equação para a reação ácido-base entre o íon etóxido ( $CH_3CH_2O^-$ ) e a água. Preveja para qual lado o equilíbrio será deslocado, sabendo que o pKa do etanol é ~16 e o da água é ~15,7.
9. Qual base é mais forte: o ânion amida ( $NH_2^-$ ) ou o ânion hidroxila ( $OH^-$ )? Justifique com base na eletronegatividade do átomo que carrega a carga negativa.
10. O fenol ( $C_6H_5OH$ ) tem um pKa de aproximadamente 10, sendo muito mais ácido que o ciclohexanol (pKa ~16). Explique essa diferença de acidez.

### Bloco 3: Ácidos e Bases de Lewis (Eletrófilos e Nucleófilos)

11. Classifique as seguintes espécies como Ácidos de Lewis (Eletrófilos) ou Bases de Lewis (Nucleófilos): a)  $BF_3$  b)  $Cl^-$  c)  $CH_3^+$  (carbocátion) d)  $H_2O$
12. Na reação entre a amônia ( $NH_3$ ) e o trifluoreto de boro ( $BF_3$ ), qual molécula atua como doadora de par de elétrons e qual atua como receptora? Qual a nova ligação formada?
13. Por que um carbocátion atua sempre como um eletrófilo forte em um mecanismo de reação?
14. Um íon brometo ( $Br^-$ ) pode atuar como ácido de Lewis? Justifique sua resposta com base na configuração eletrônica e carga.
15. Identifique o nucleófilo e o eletrófilo na primeira etapa da reação de adição de  $HCl$  a um alceno (onde a ligação pi ataca o hidrogênio do cloreto de hidrogênio).

### Bloco 4: Setas Curvas e Ressonância

16. Qual é a principal diferença de significado entre uma seta reta de ponta dupla ( $\leftrightarrow$ ) e duas setas retas em sentidos opostos ( $\rightleftharpoons$ )?

17. Considere o ânion carboxilato ( $CH_3COO^-$ ). Usando regras de estruturas contribuintes, explique por que as duas ligações carbono-oxigênio possuem exatamente o mesmo comprimento na realidade.

18. Em um mecanismo de reação, uma seta curva é desenhada saindo de um íon cloreto ( $Cl^-$ ) em direção a um carbocátion ( $CH_3^+$ ). O que essa seta representa fisicamente?

19. Quais das seguintes regras de ressonância são FALSAS?

- a) A posição dos núcleos atômicos pode ser alterada.
- b) Apenas pares de elétrons não ligantes e elétrons pi podem ser movidos.
- c) O número total de pares de elétrons deve permanecer o mesmo.

20. Desenhe (ou descreva) as duas principais estruturas de ressonância para o íon nitrato ( $NO_3^-$ ) e indique onde as cargas formais negativas estão localizadas em cada estrutura contribuinte.