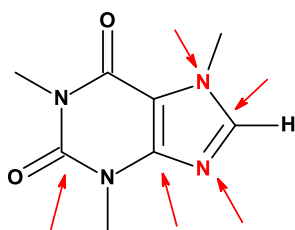
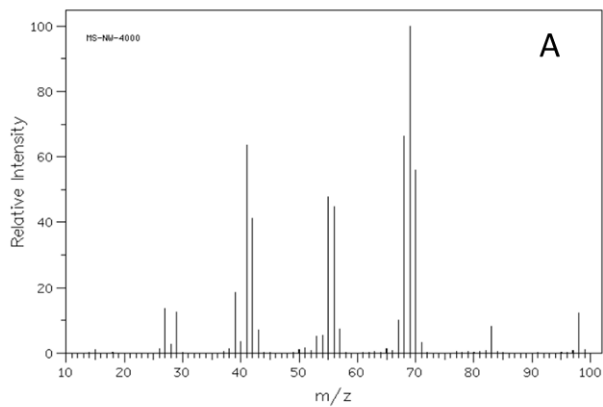


QFL0341 - Estrutura e Propriedades de Compostos Orgânicos Noturno (2019)
2ª Lista de exercícios

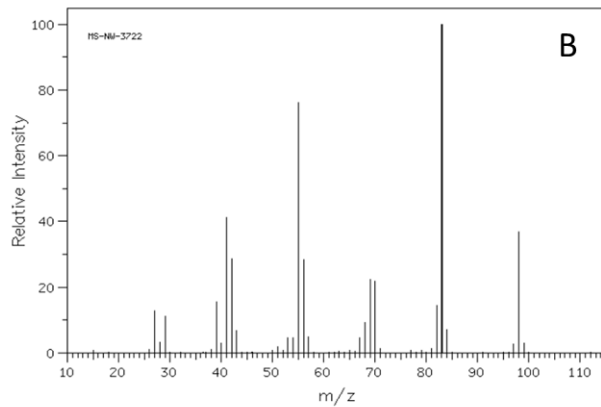
- 1) O formaldeído contém uma ligação dupla C=O. Represente a estrutura de Lewis e com linhas, indique a hibridização de cada átomo mostrando como os mesmos se combinam.
- 2) Qual a geometria esperada para os seguintes átomos nas moléculas?
 - a) Do átomo de oxigênio no metanol;
 - b) Do átomo de nitrogênio na trimetilamina;
 - c) Do átomo de fósforo na fosfina (:PH₃).
- 3) Dada a estrutura do metano (CH₄), demonstre como poderiam ser formados um radical, um carbocátion e um carbânion. Represente suas estruturas com os orbitais indicando suas geometrias.
- 4) Durante o processo de hidrogenação catalítica de óleos vegetais, parte dos ácidos graxos *cis* são convertidos em ácidos graxos *trans*.
 - a) Demonstre como essa reação de isomerização ocorre no caso do ácido oleico (CH₃(CH₂)₇CH=CH(CH₂)₇COOH; ou ácido graxo (9Z)-octadec-9-enoico; também conhecido como ácido graxo 18:1 *cis*-9, ou Δ⁹ para indicar a posição da ligação dupla) para 18:1 *trans*-9 através de uma reação envolvendo espécies radiculares.
 - b) Qual o efeito no ponto de fusão parte significativa do ácido oleico *cis* é convertida para *trans*?
- 5) Espécies radiculares estão envolvidas em danos de lipídeos de membrana (lipoperoxidação lipídica), incluindo ácidos graxos poli-insaturados levando a degradação dos mesmos. Quais seriam as posições na cadeia carbônica desses ácidos graxos insaturados onde os radicais seriam mais facilmente formados? Mostre como esses radicais são estabilizados mostrando segmentos desses ácidos graxos. Utilize como exemplo o ácido oleico do problema anterior.
- 6) Complete a estrutura da cafeína mostrando os elétrons não ligantes que estão faltando. Qual a hibridização dos átomos indicados pelas setas?



- a) A cafeína (estrutura acima) apresenta um pico do íon molecular igual a m/z 194 Da.
 - a) Sabendo-se que a cafeína possui 4 nitrogênios e 2 oxigênios, determine a fórmula molecular e o índice de deficiência de hidrogênio (IDH) para esse composto.
 - b) O espectro de infravermelho apresenta fortes bandas em 1699 e 1659 cm⁻¹ relativas à presença das funções imina e amida em sua estrutura. Também apresenta picos resultantes da alceno em 3110, 1599 e 746 cm⁻¹.
- 7) O etilciclopentano e seu isômero metilciclohexano possuem a mesma fórmula molecular C₇H₁₄ (MM 98 Da). Atribua os cicloalcanos aos espectros de massas A e B abaixo.

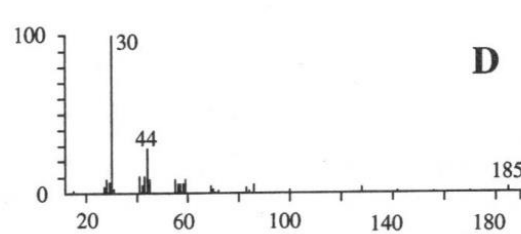
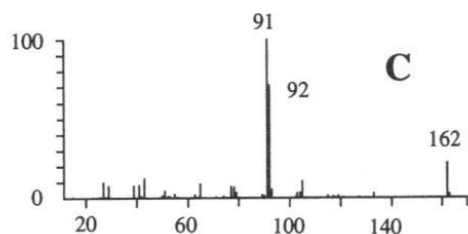
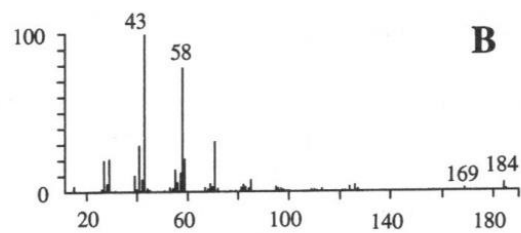
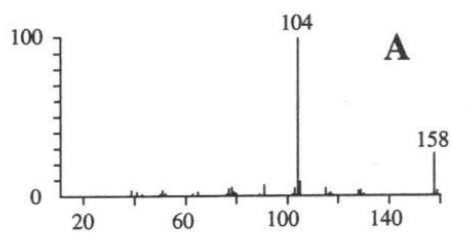


Source Temperature: 280 °C
Sample Temperature: 180 °C
Reservoir, 75 eV



Source Temperature: 270 °C
Sample Temperature: 180 °C
Reservoir, 75 eV

8) Associe a dodecilamina, 2-dodecanona, 1-fenilexano e 4-fenilcicloexeno aos espectros de massas A-D e represente os principais modos fragmentacionais para cada composto.



8) Como a espectroscopia no Infravermelho permitiria distinguir os seguintes pares de isômeros?

- a) $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ e CH_3OCH_3 b) cicloexano e 1-hexeno
b) $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}$ e $\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{CHO}$

10) Sugira potenciais estruturas para compostos que apresentem as seguintes características:

- a) C_5H_8 , com absorções no IV em 3300 e 2150 cm^{-1} ;
b) $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$, com uma forte absorção no IV em 3400 cm^{-1} ;
c) $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$, com uma forte absorção no IV em 1715 cm^{-1} ;
d) $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}$, com absorções no IV em 1600 e 1500 cm^{-1} .

11) Como o infravermelho poderia distinguir entre os seguintes pares de isômeros?

- a) $\text{HCCCH}_2\text{NH}_2$ e $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$ b) CH_3COCH_3 e $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHO}$