

GUIA DE ESTUDOS

QFL1221 – Estrutura de Compostos Orgânicos

I. Princípios de reatividade e o conceito de mecanismo, AULA 1

Para começar a entender química orgânica, você deve aprender alguns conceitos importantes, que estão sublinhados/negrito abaixo.

Comece lendo o Capítulo 1, p.1–48.

Sugestão: algumas referências mais avançadas estão no arquivo [QFL1221_Aula_1.zip](#).

Agora vamos pensar sobre o que aprendemos. Considere o monóxido de carbono.

- Mostre todas as formas de representar a estrutura química do monóxido de carbono usando estruturas de Kekulé.
- Qual a relação entre estas estruturas? Tratam-se de **estruturas de ressonância** ou **espécies em equilíbrio**?
- Quais as **cargas formais** de cada átomo nas representações nas quais todos os átomos estão com os octetos completos?
- Se houver alguma estrutura sem cargas formais nos átomos, indique se há **cargas parciais (δ^+ e δ^-)** nos átomos. Identifique os elétrons não ligantes.
- Qual o **número de oxidação** e o **número de coordenação** do átomo de C no CO.
- Qual o sentido do **vetor momento de dipolo**, mostre usando as notações usadas na química e na física (sabia que existem duas notações?).
- Sabendo-se que o **momento de dipolo (μ)** do monóxido de carbono é $\mu = 0,11$ D pode-se concluir que ele é praticamente apolar (isso é verdade? qual o valor do momento de dipolo de moléculas que você considera polar, *e.g.*, água). Este resultado poderia ser explicado considerando as estruturas possíveis para o CO, sem usar a **teoria dos orbitais moleculares**?
- Como são representadas as ligações entre os átomos de C e O considerando-se o modelo de hibridização? Identifique as ligações sigma (σ) e pi (π) e indique qual a **geometria** dessa molécula?
- Construa o **diagrama de orbitais moleculares** para o CO a partir dos **orbitais atômicos** do C e do O. Qual a ordem de ligação entre o C e o O? Este diagrama baseia-se no modelo de **hibridização**?
- O que é **espectroscopia de fotoelétrons (PES)**? Você consegue encontrar o espectro de PES do CO? Como ele se relaciona com o diagrama de orbitais moleculares?
- A **energia de dissociação de ligação (BDE)** do CO é 1046 kJ mol^{-1} . Qual ligação química é mais forte, CO ou N_2 (seu **análogo isoeletrônico**)? Existe algum padrão entre os valores de BDE e moléculas homonucleares em comparação com heteronucleares?

- l) A distância entre os átomos de C e O é de 114 pm (*ou* 1,14 Å, mas angstrom não é uma unidade do SI!). Caso a ordem de ligação do CO fosse 1 o que aconteceria com a distância entre os átomos (arriscaria um valor aproximado)?
- m) Identifique o **orbital molecular ocupado com energia mais alta (HOMO)** e o **orbital molecular desocupado de energia mais baixa (LUMO)** do CO. Você seria capaz de desenhá-los?
- n) O envenenamento por monóxido de carbono envolve a ligação de CO com os átomos de ferro da hemoglobina, impedindo o transporte de oxigênio. Qual átomo do CO se liga ao ferro e qual o motivo? A análise do HOMO pode ajudar a esclarecer este resultado experimental?