

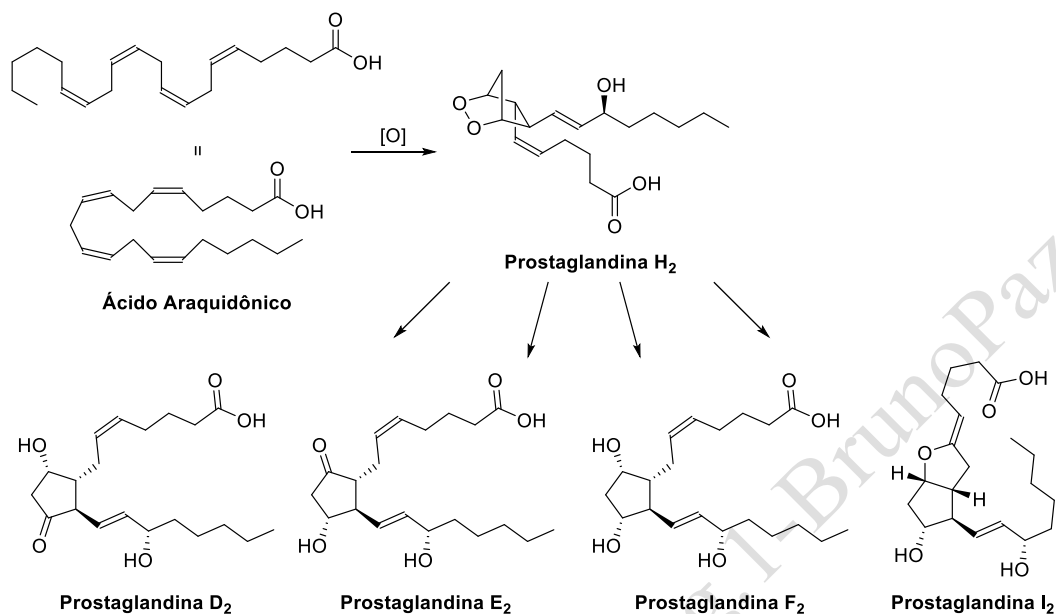
**USP-QFL0344 Simulado Prova 1**

**Nome Completo:** \_\_\_\_\_

**Número USP:** \_\_\_\_\_

<b>Questão</b>	<b>Nota</b>
<b>1</b>	
<b>2</b>	
<b>3</b>	
<b>4</b>	
<b>5</b>	
<b>6</b>	
<b>Total</b>	<b>/103.2</b>

1- Processos inflamatórios induzem à conversão do ácido araquidônico em diferentes prostaglandinas através de uma cascata de reações bioquímicas. Este processo é mediado pelas enzimas ciclooxygenases. (13.6 pontos)

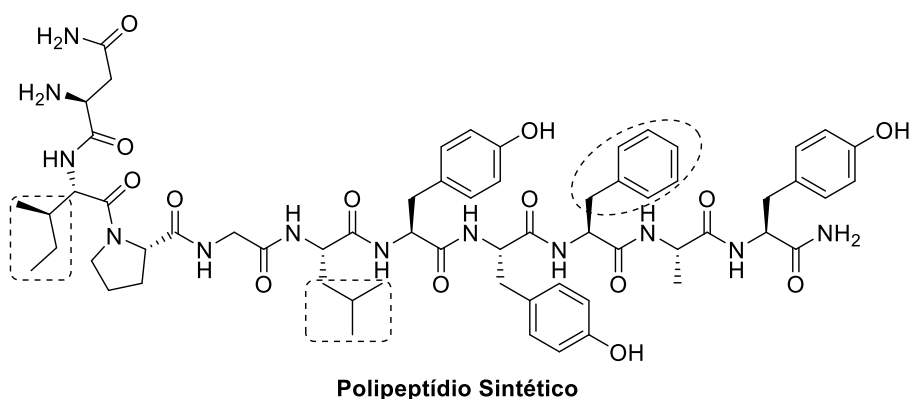


a) Dê a nomenclatura IUPAC do ácido araquidônico.

b) Identifique todos os grupos funcionais presentes nas prostaglandinas H<sub>2</sub> e I<sub>2</sub>. Assinale suas duplas ligações como *E* ou *Z*.

c) Assinale todos os estereocentros da prostaglandina E<sub>2</sub> como *R* ou *S*.

2- Adiponectina é um hormônio proteico produzido pelos adipócitos que modula diversos processos metabólicos como os níveis de glicose e oxidação de ácidos graxos. É extensivamente estudada por suas propriedades antidiabética, anti-inflamatória, antiobesidade e cardioprotetora. O polipeptídeo sintético dado a seguir é um agonista de receptores de adiponectina (*PLoS ONE* 2018, 13, e0199256). (4.2 pontos)

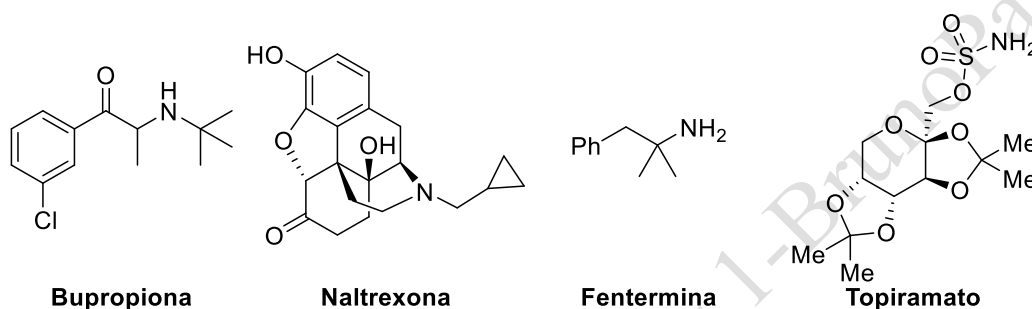


a) Mostre todos os grupos funcionais presentes neste polipeptídio sintético.

b) De o nome das 3 ramificações destacadas.

3- Várias terapias combinadas foram aprovadas nos últimos anos para auxiliar no tratamento de obesidade, como bupropiona e naltrexona (*eClinicalMedicine* **2022**, *49*, 101436.) ou fentermina e topiramato (*New Eng. J. Med. Evid.* **2022**, *1*, EVIDo2200014.).

(11 pontos)



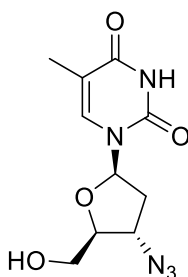
a) Assinale como *R* ou *S* todos os estereocentros do topiramato.

b) Qual grupo funcional está presente nos três sistemas cíclicos do topiramato?

c) Qual tipo de sistema bicíclico está presente no topiramato?

d) Indique todos os grupos funcionais presentes na naltrexona e na bupropiona. Teoricamente, estes dois compostos podem existir na forma de quantos estereoisômeros?

4- A Zidovudina (AZT) foi o primeiro antirretroviral aprovado para o tratamento da AIDS (FDA 1987). Sua estrutura é semelhante à dos nucleosídeos, porém a hidroxila da posição 3' foi substituída por outro grupo funcional. Quando o AZT é incorporado à cadeia de cDNA que está sendo transcrita, age como um terminador de cadeia, encerrando a síntese viral de cDNA. (21.4 pontos)



AZT - Zidovudina

a) Indique todos os grupos funcionais presentes no AZT.

b) O sistema heterocíclico do AZT é aromático? Mostre as estruturas de Lewis que justificam sua resposta.

c) Mostre as estruturas de Lewis do grupo funcional R–N<sub>3</sub>, presente no AZT.

d) Diga a hibridização de todos os nitrogênios presentes no AZT.

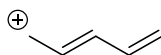
e) Em que tipo de orbital estão os pares de elétrons dos nitrogênios presentes no sistema heterocíclico do AZT?

**5-** A compreensão de aspectos estruturais dos compostos orgânicos é fundamental para explicar sua reatividade. **(37 pontos)**

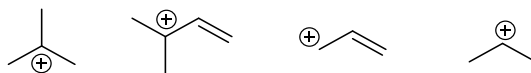
a) Mostre o diagrama de orbitais moleculares simplificado do sistema  $\pi$  do cátion ciclopentadienila. Ele é aromático ou antiaromático?



b) Mostre as estruturas de ressonância e o diagrama de orbitais moleculares do sistema  $\pi$  do cátion a seguir. Identifique os orbitais de fronteira. Esta espécie deve reagir como eletrófilo ou nucleófilo?

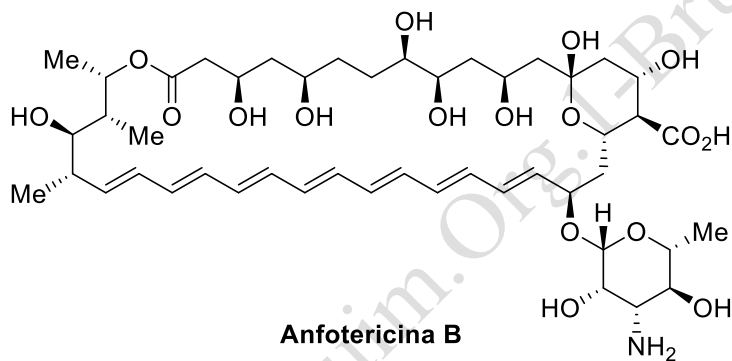


c) Ordene os cátions a seguir segundo sua estabilidade. Indique quais efeitos são responsáveis pela estabilização de cada um.



6- A anfotericina B é um antifúngico de amplo espectro, mas relativamente tóxico, cujo modo ação advém da sua interferência na síntese da parede celular do fungo.

(16 pontos)



a) Quantos elétrons estão presentes no sistema  $\pi$  do polieno presente na anfotericina B?

b) Quantos orbitais moleculares ligantes e antiligantes estão presentes no sistema  $\pi$  deste polieno?

c) As ligações simples entre os carbonos presentes neste sistema poliênico são mais curtas ou mais longas que a ligação  $\sigma\text{C-C}$  do etano? Explique.