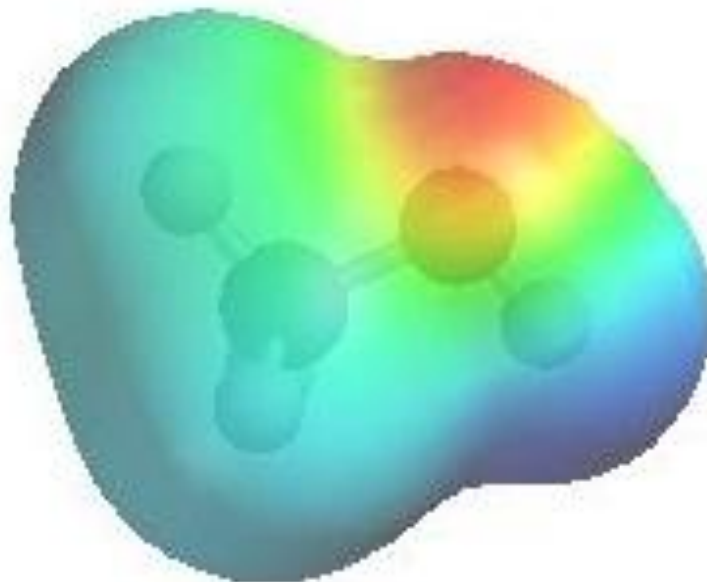
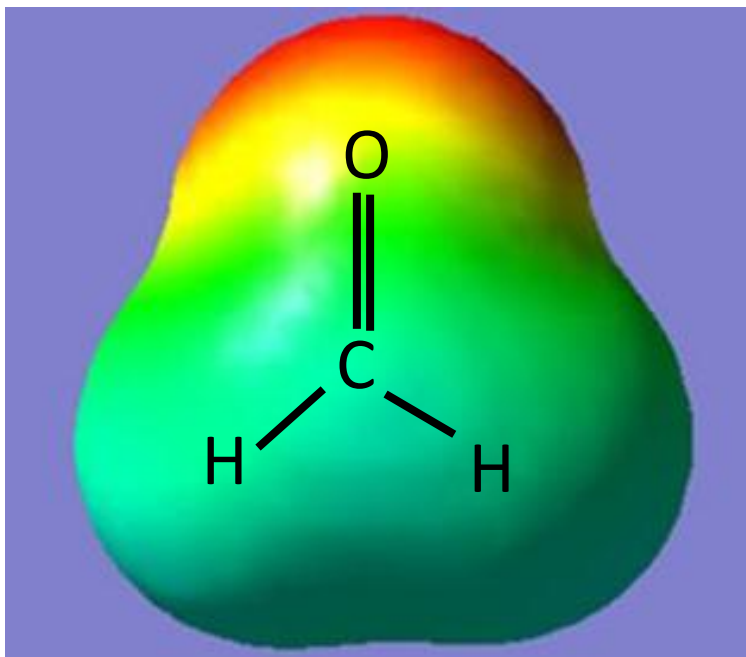


# Polaridade das ligações C-O

**Formaldeído**

*versus*

**Metanol**



-

+



**Onde estudar??**

**Atkins e Jones, Princípios de Química, Cap. 3 >> p. 93-131**

**Pense:** Porque a polaridade influencia a acidez e como se trata os dados numericamente. **Pense com um exemplo:**

**Qual entre os dois ácidos abaixo é o mais forte?**

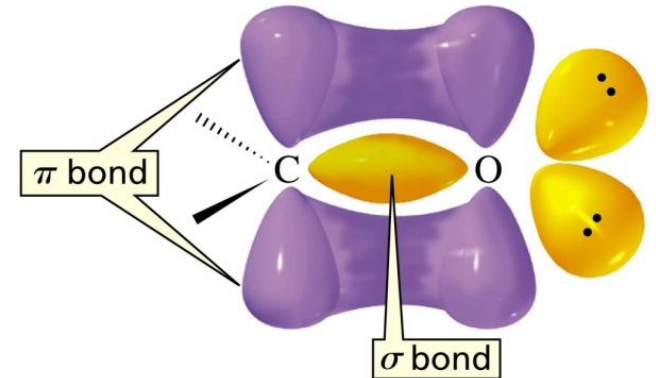
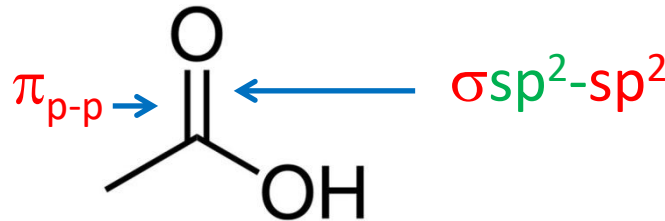
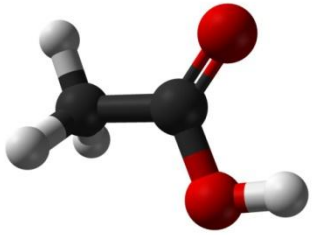
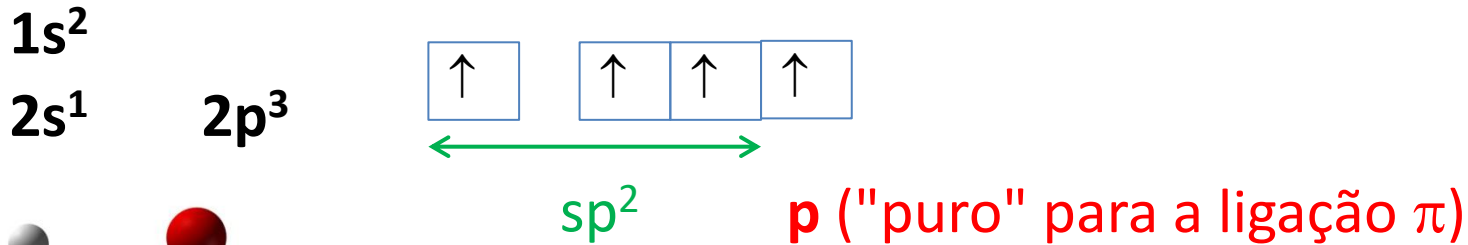
**Ácido acético ou ácido tricloroacético. Explique sua resposta**

**Reveja em casa:** qual a constante de dissociação em cada caso. **Não deixe de aplicar o que está aprendendo**

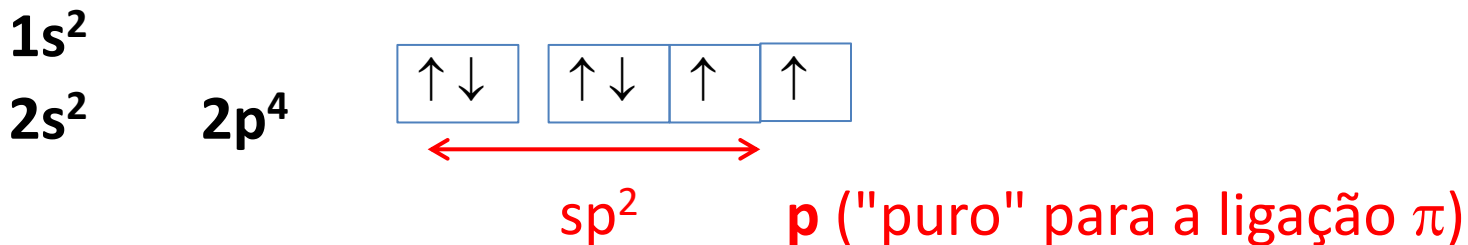
# Ligações C=O e polaridade das ligações C-O

## A molécula de ácido acético

### Distribuição de elétrons no Carbono:



### Distribuição de elétrons no Oxigênio da carbonila:





CH<sub>3</sub>  
ou CCl<sub>3</sub> →  
pKa = 4.76  
ou  
pKa = 0.66

$$1/(10^{pKa}) = Ka$$

$$Ka = 1,74 \times 10^{-5}$$

ou

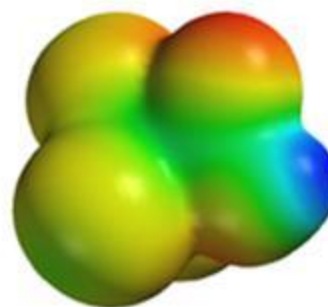
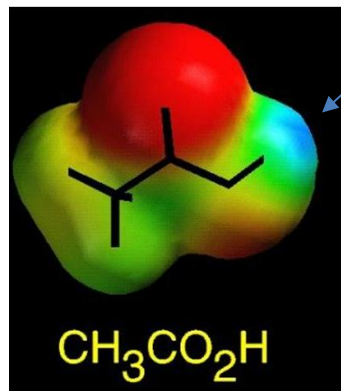
$$Ka = 0.22$$

$$Ka = [\text{CH}_3\text{CO}_2^-][\text{H}^+] / [\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H}]$$

Supondo 1 mol/L, qual o pH??? (*percepção numérica da força do ácido*)

CH<sub>3</sub>CO<sub>2</sub>H >>> [H<sup>+</sup>] = 0.004 mol/L >> pH = 2.4

CCl<sub>3</sub>CO<sub>2</sub>H >>> [H<sup>+</sup>] = 0.5 mol/L >> pH = 0.3



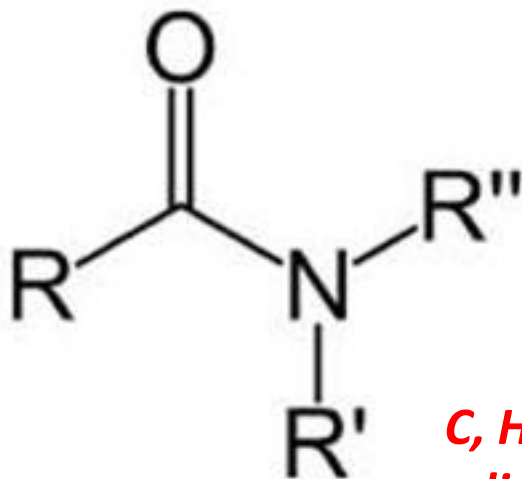
Acúmulo de  
carga positiva no  
próton



# Um caso particular para a bioquímica >> *Ligação amida*

## *Pense:*

- 1. Como é uma ligação amida?*
- 2. Como explicamos as ligações pela teoria de ligação de valência?*
- 3. Existe alguma particularidade nesta ligação - dica: pense na deslocalização de elétrons em orbitais "p"*

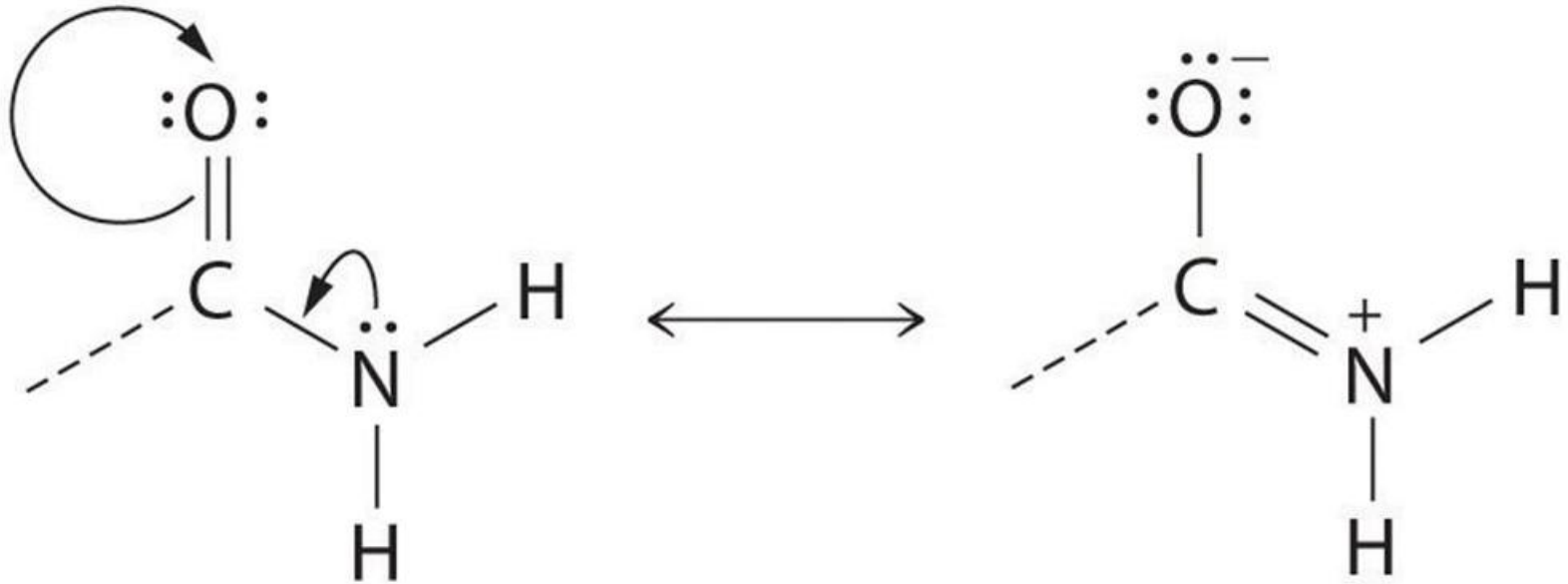


Distribuição de elétrons para C, O e N >>  
quadro

Tipos de ligações pela teoria de ligação de  
valência

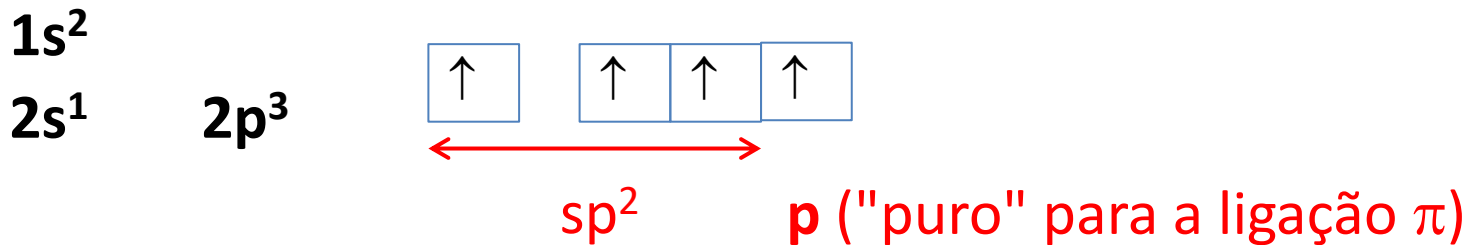
***C, H e O permanecem com um orbital "p" não hibridizado e livre para realizar ligações  $\pi$***

## Deslocalização de elétrons em uma ligação amida

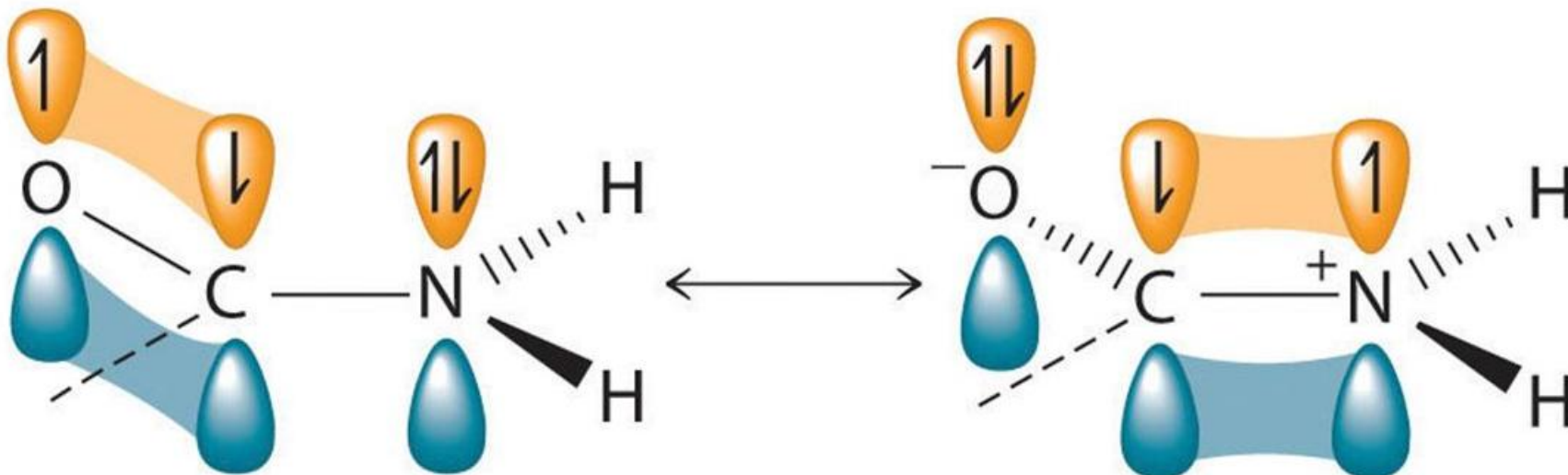
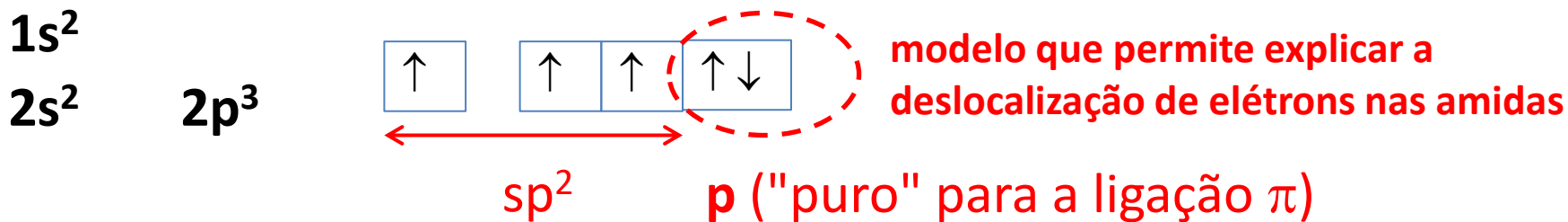


*Como explicar este fenômeno com base nos elétrons de orbitais “p”*

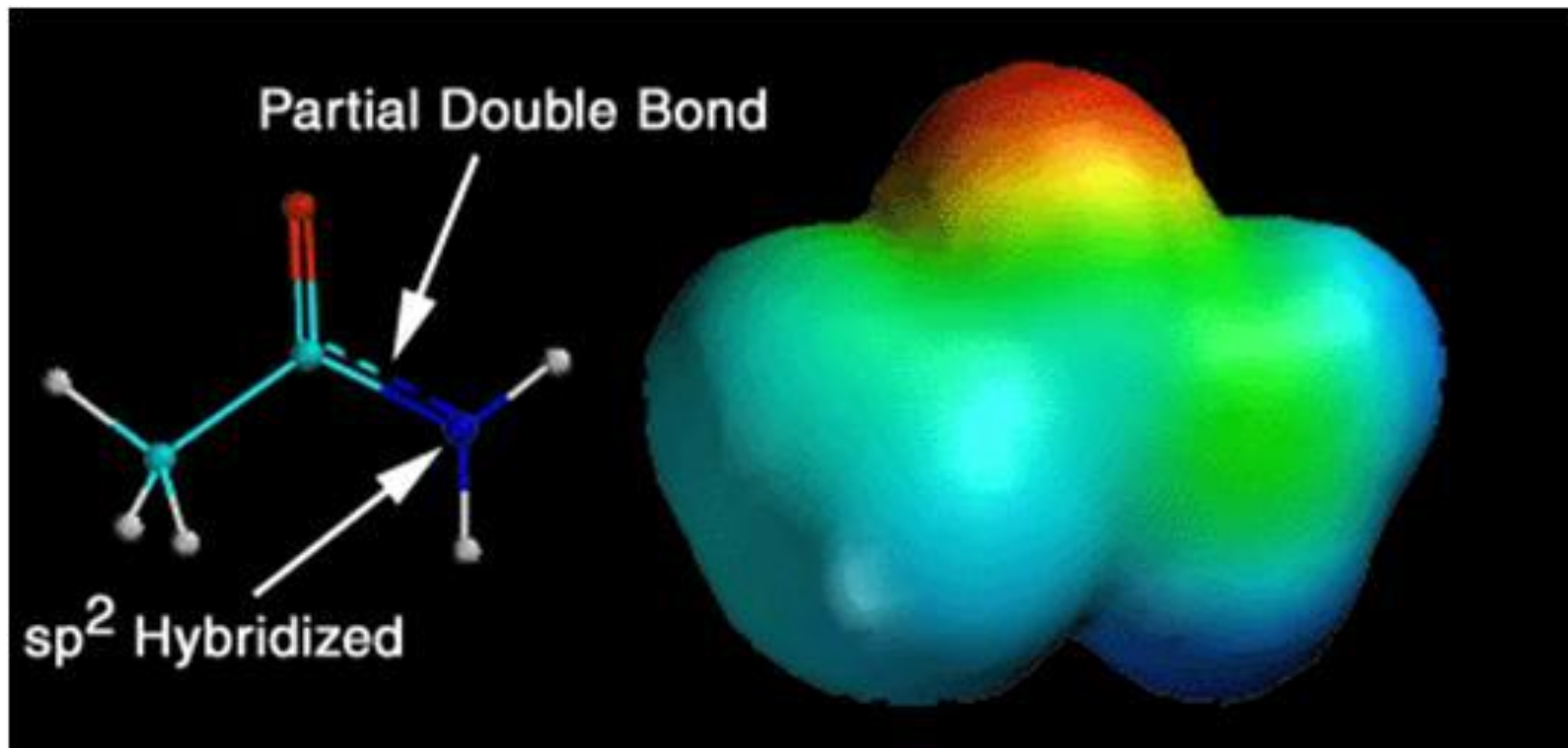
## Distribuição de elétrons no **Carbono**:



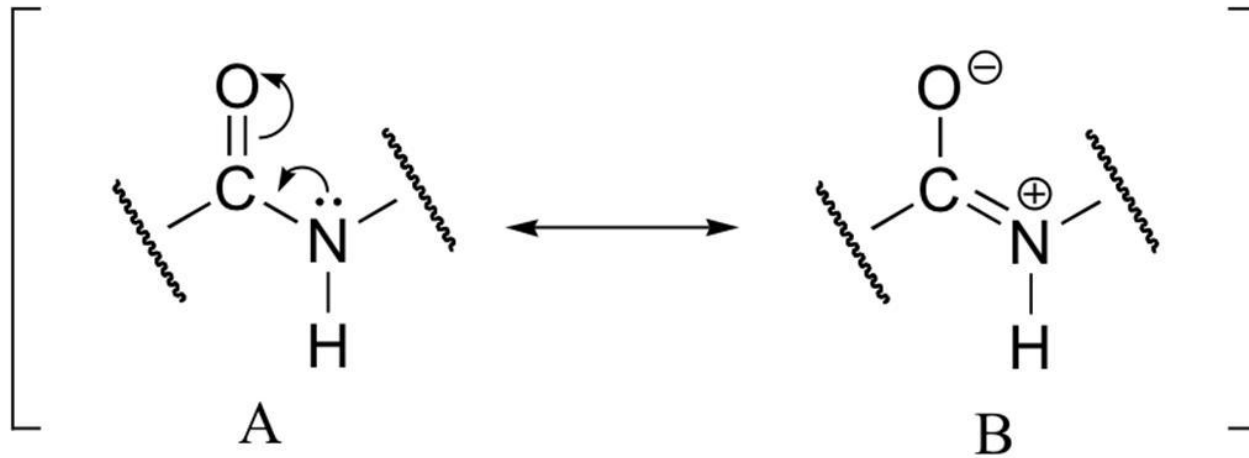
## Distribuição de elétrons no **Nitrogênio**:



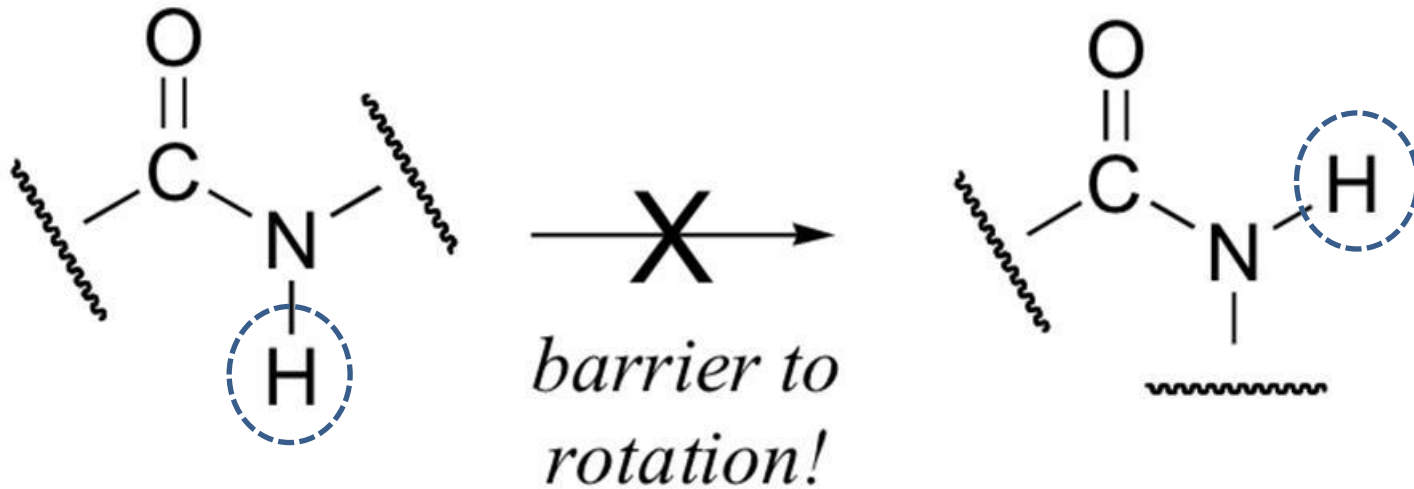
# Heat map para a densidade eletrônica numa amida

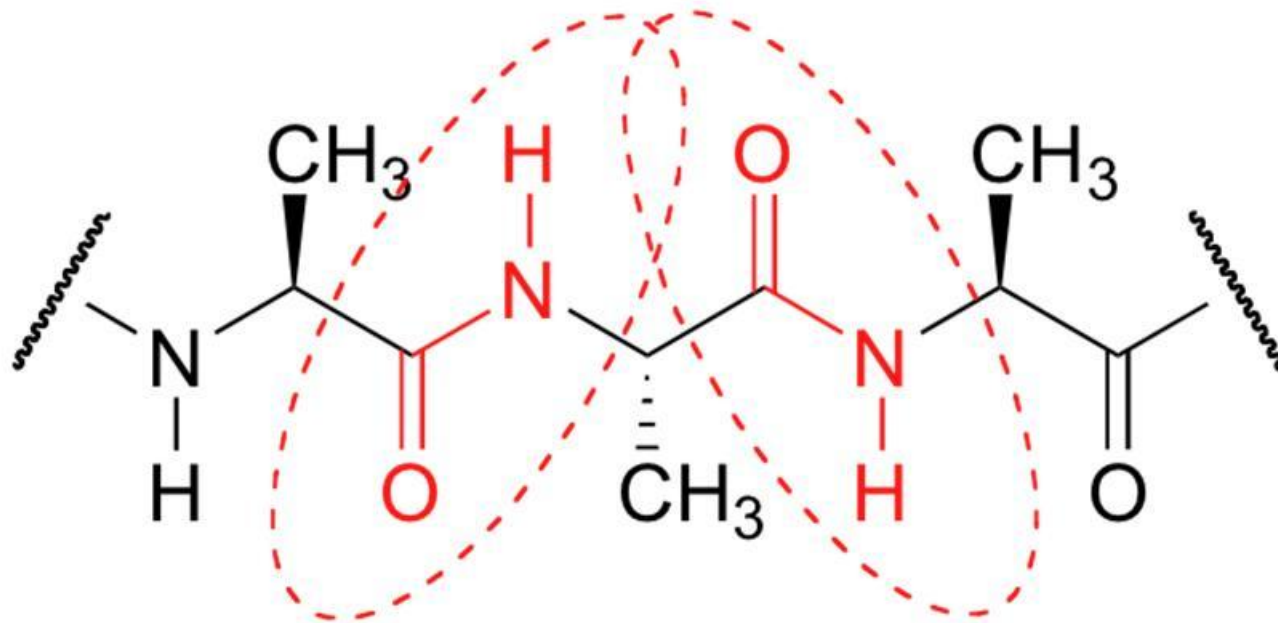


# Implicações para uma ligação peptídica e a estrutura tridimensional das proteínas



A ressonância dos elétrons  $\pi$  significa uma barreira para a rotação livre da ligação **C-N**

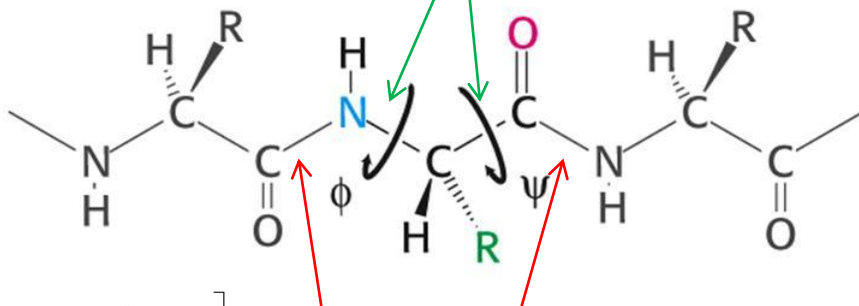




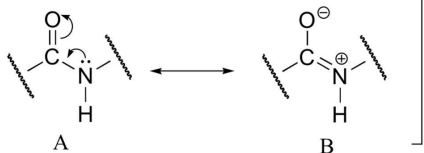
peptide bonds in a polypeptide

***Qual a implicação do deslocamento de elétrons nas amidas para a estrutura das proteínas?***

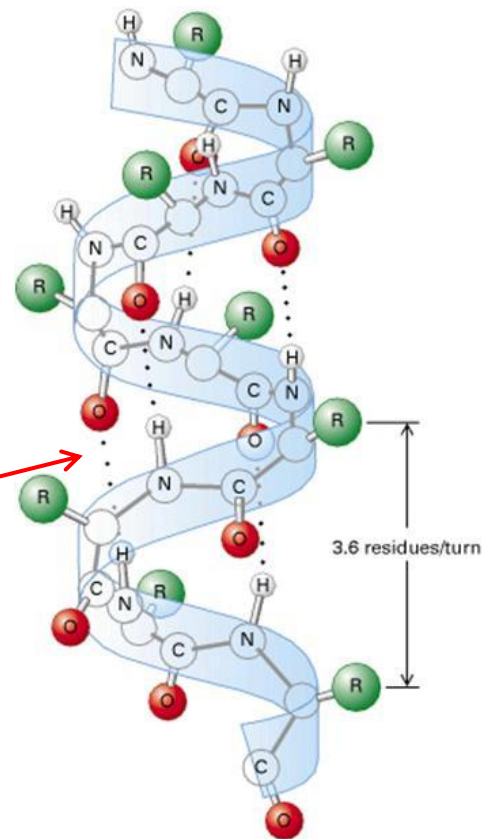
ligações com giro livre



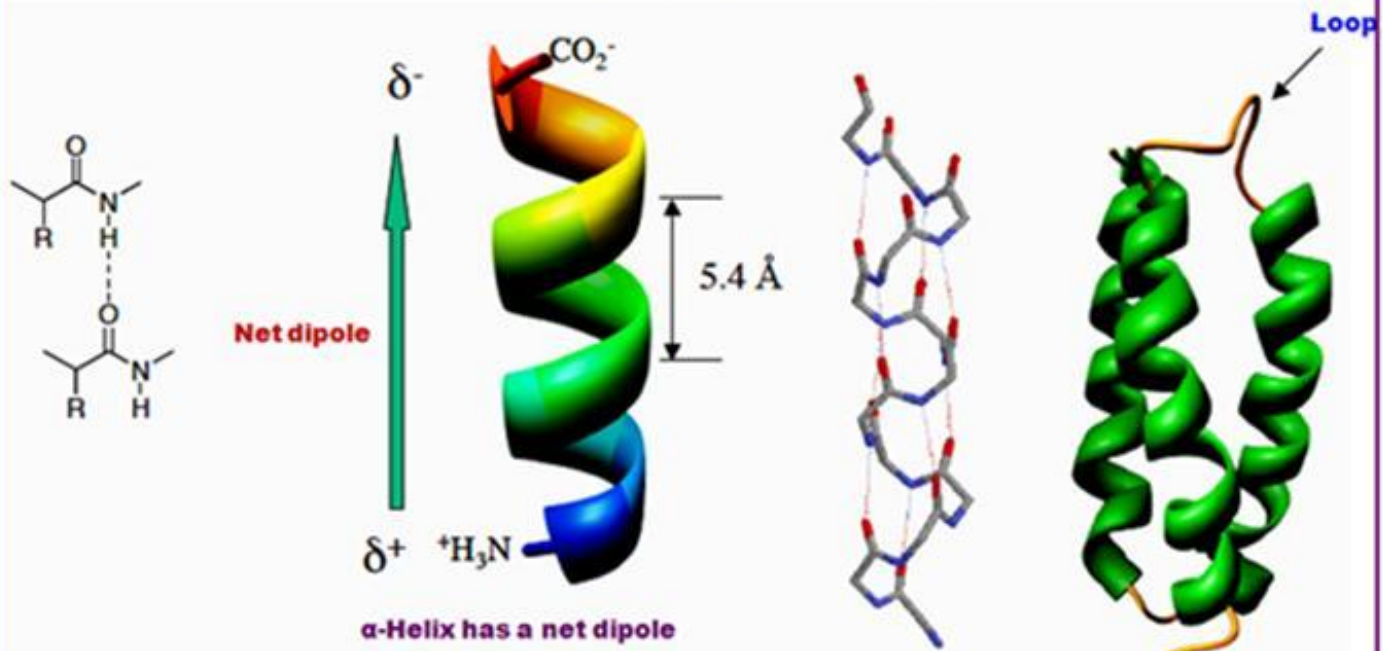
ligações fixas



Pontes de H intramoleculares entre o H da ligação N-H e o Oxigênio da ligação C=O estabilizam um polipeptídeo na forma torcida (helicoidal)



## $\alpha$ -Helix: Amino Acids Wound Into A Helical Structure



$\alpha$ -Helix are connected by loops

Várias alfa-hélices formando a parte proteica de uma molécula de hemoglobina

