

## Problemas adicionais de Química Bio-Inorgânica 2025

1) O gás  $\text{CO}_2$  reage com o íon hidróxido ( $\text{HO}^-$ ) rapidamente formando  $\text{HCO}_3^-$ . Existe uma diferença estrutural significativa entre o  $\text{CO}_2$  e o  $\text{HCO}_3^-$ . Com base na teoria de ligação de valência responda as questões abaixo.

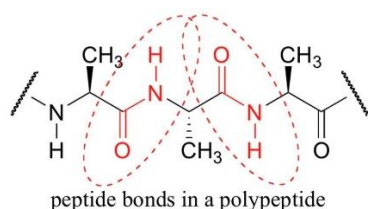
a) Qual deve ser a hibridação do Carbono na molécula de  $\text{CO}_2$ ? Justifique sua resposta

b) Quais são as ligações formadas entre o Carbono e os Oxigênio na molécula de  $\text{CO}_2$ ?

c) Qual deve ser a estrutura (distribuição no espaço) dos átomos na molécula de  $\text{HCO}_3^-$ ? Justifique sua resposta com base na hibridação prevista para o Carbono e indique o ângulo previsto entre as ligações

d) Você pode prever diferença de solubilidade em água para as moléculas de  $\text{CO}_2$  e  $\text{HCO}_3^-$ ? Justifique sua resposta

2) Duas ligações peptídicas típicas estão ilustradas na figura abaixo. Trata-se da função química AMIDA. O cálculo das densidades eletrônicas nos átomos em questão aponta para uma maior concentração de carga negativa próxima aos oxigênios, como era de se esperar. No entanto, o mesmo cálculo mostra uma densidade eletrônica atipicamente mais elevada entre o C (carbonílico) e o N.



Com base nas informações apresentadas e seus conhecimentos sobre química bio-inorgânica responda:

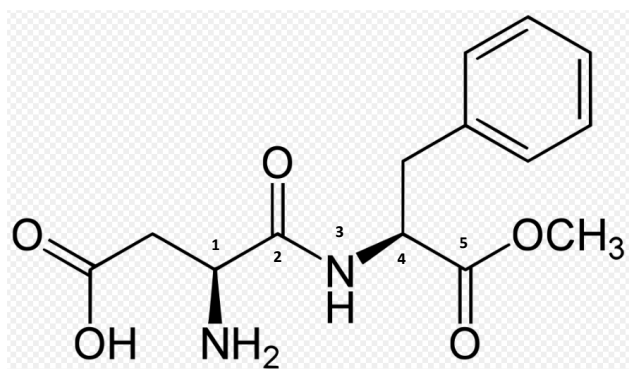
a) O que poderia explicar a densidade eletrônica atipicamente elevada entre os átomos de C (da ligação  $\text{C}=\text{O}$ ) e o NH (da ligação  $\text{N}-\text{H}$ ). Indique as hibridações dos átomos envolvidos para explicar o fenômeno observado.

b) Existe um grupo CH entre um N-H e uma carbonila ( $\text{C}=\text{O}$ ). Este CH está ainda ligado a um grupo  $\text{CH}_3$ . Qual a hibridação deste Carbono?

c) Se os elétrons de ligação dos átomos mencionados nos itens “a” e “b” estão em orbitais de características e posições no espaço diferentes, seria possível prever a deslocalização de

elétrons entre o Oxigênio da esquerda (marcado com a elipse pontilhada da esquerda) e o carbono da carbonila da direita (marcado na segunda elipse pontilhada à direita)? Explique sua resposta. Use diagramas e desenhos se necessário.

3) O Aspartame é um adoçante muito usado atualmente. Trata-se de uma molécula com ligações peptídicas (função amida), cuja estrutura está indicada na figura abaixo. Nesta figura, 5 átomos foram identificados com os números de 1 a 5. Os átomos de Carbono da cadeia principal não são mostrados com a letra C, mas podem ser identificados em todas as intersecções da cadeia principal. A figura também não mostra os Hidrogênios ligados aos Carbonos da cadeia principal, nem ao anel aromático.



- Com base na teoria de ligação de valência, qual deve ser a hibridação dos átomos indicados com números de 1 a 5 na figura anterior?
- Entre quais átomos da cadeia principal é possível prever que exista deslocalização de elétrons (ressonância)? Porque?
- Seria possível que os elétrons do carbono marcado com o número 2 chegasse até o Carbono indicado com o número 5. Explique sua resposta.