

aula anterior.....

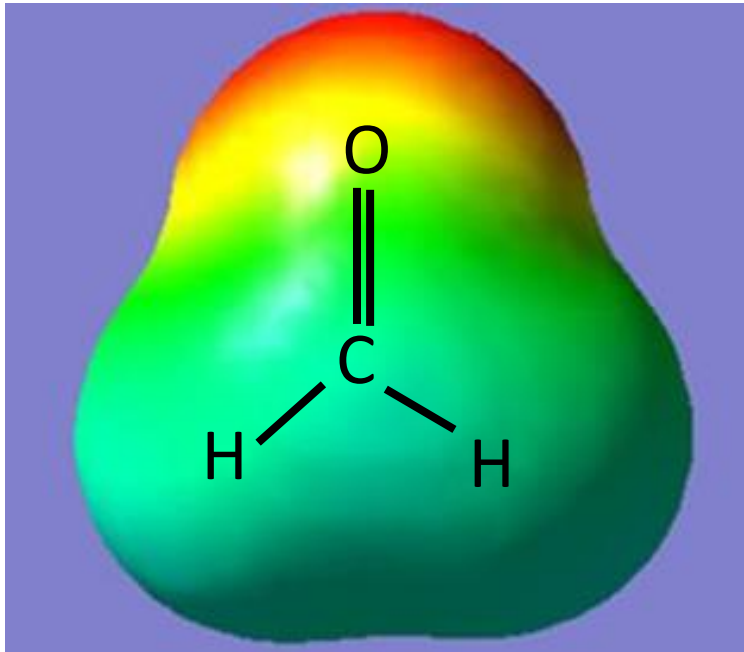
Onde estudar??

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

Como deve ser a molécula de CO₂?

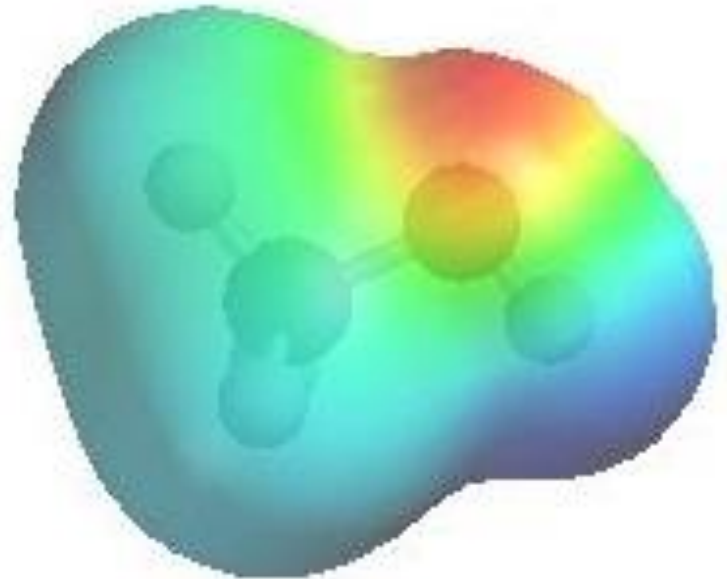
Polaridade das ligações C-O

Formaldeído



versus

Metanol



-

+



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?

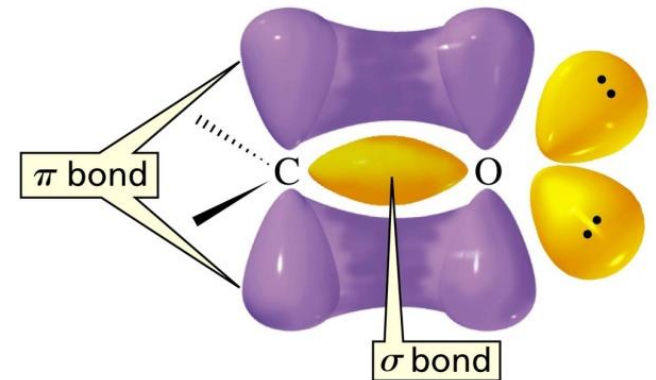
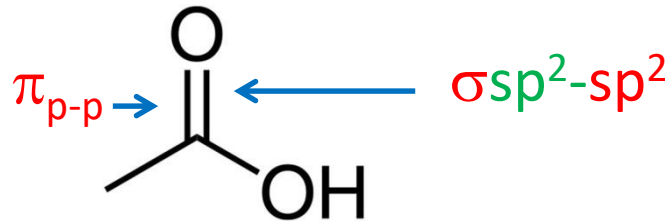
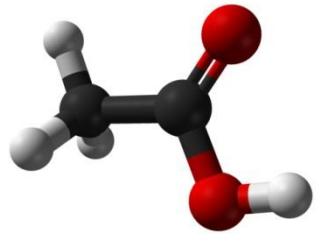
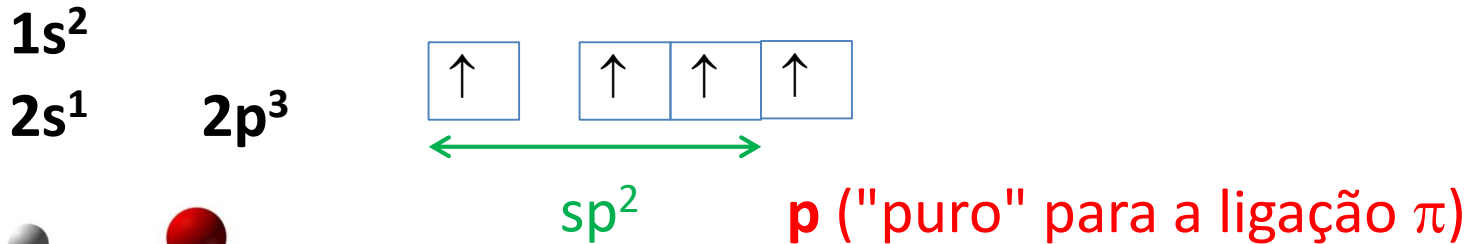
Ácido acético ou ácido tricloroacético. Explique sua resposta

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

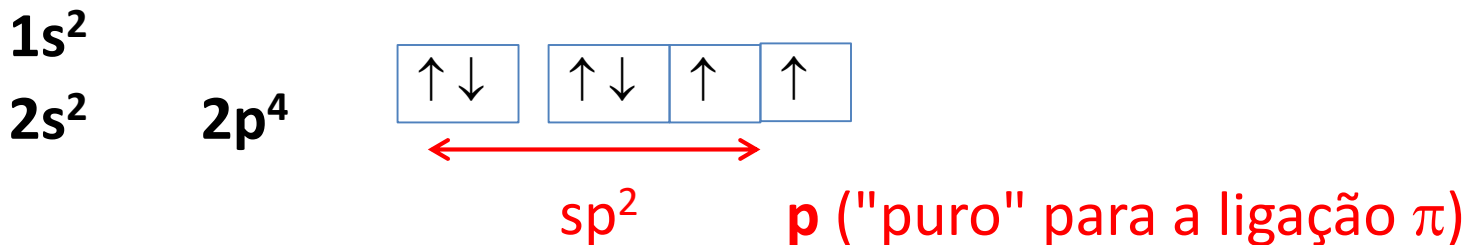
Ligações C=O e polaridade das ligações C-O

As molécula de ácido acético

Distribuição de elétrons no Carbono:



Distribuição de elétrons no Oxigênio da carbonila:





CH_3
 ou CCl_3

\rightarrow

$\text{pKa} = 4.76$
 ou
 $\text{pKa} = 0.66$



$$1/(10^{\text{pKa}}) = K_a$$

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

ou

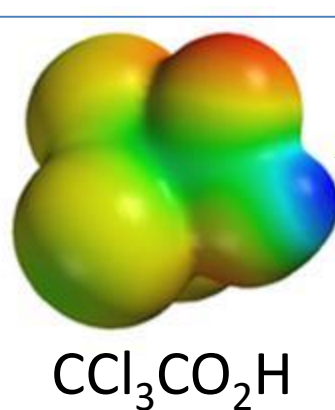
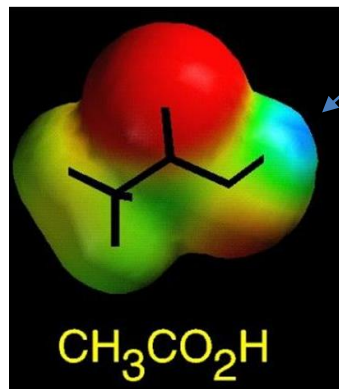
$$K_a = 0.22$$

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

Supondo 1 mol/L, qual o pH???

$\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H} \gg \gg [\text{H}^+] = 0.004 \text{ mol/L} \gg \text{pH} = 2.4$

$\text{CCl}_3\text{CO}_2\text{H} \gg \gg [\text{H}^+] = 0.5 \text{ mol/L} \gg \text{pH} = 0.3$



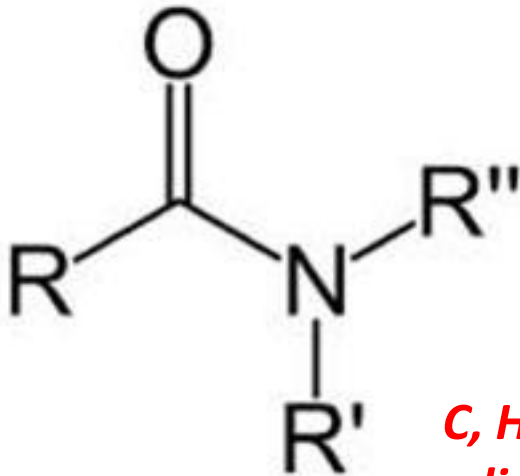
Acúmulo de carga positiva no próton



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"*

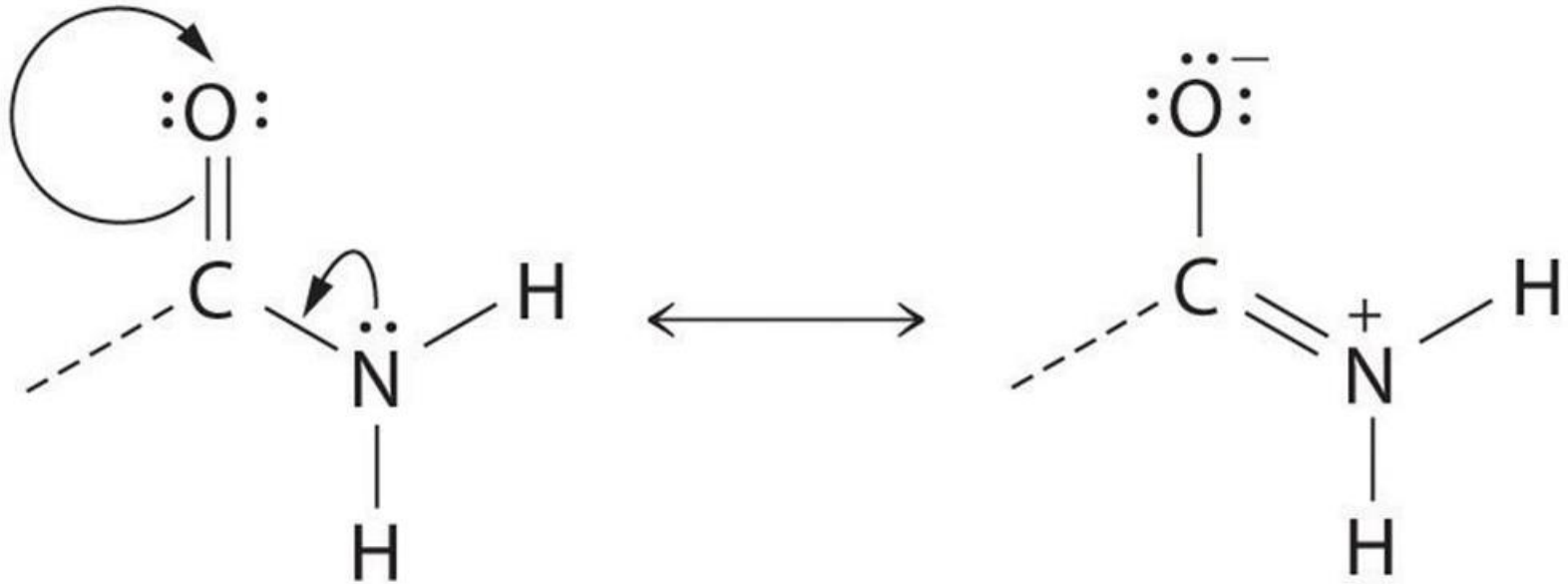


Distribuição de elétrons para C, O e N >>
quadro

Tipos de ligações pela teoria de ligação de
valência

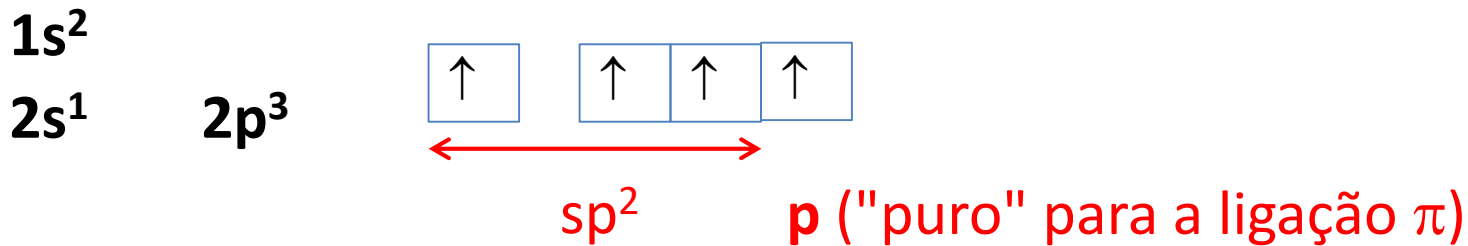
C, H e O permanecem com um orbital "p" não hibridizado e livre para realizar ligações π

Deslocalização de elétrons em uma ligação amida

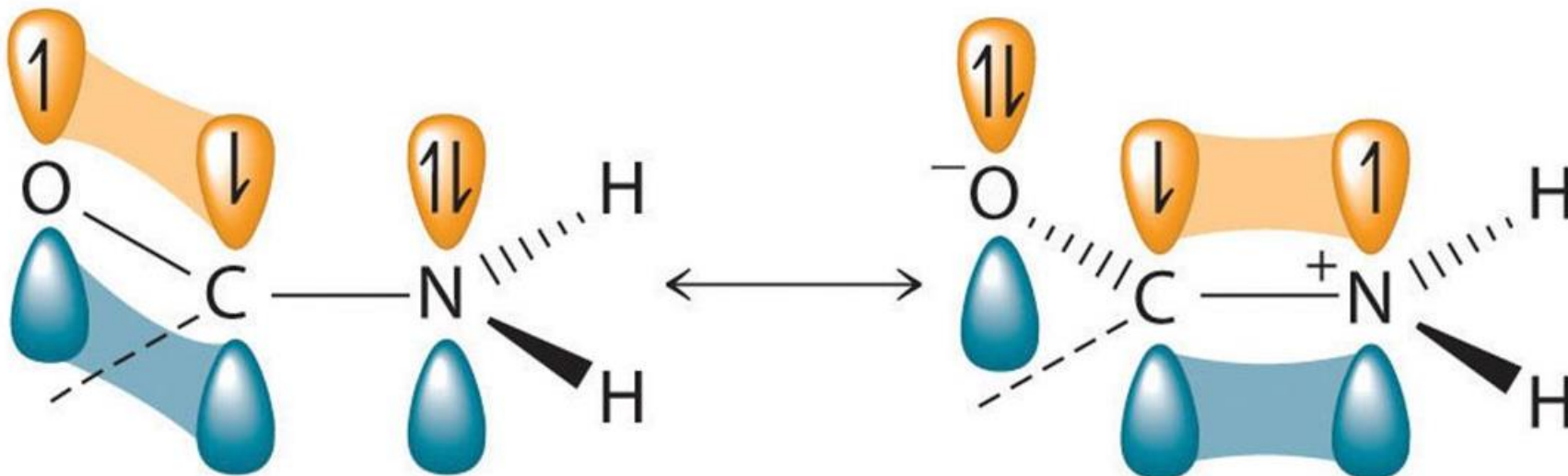
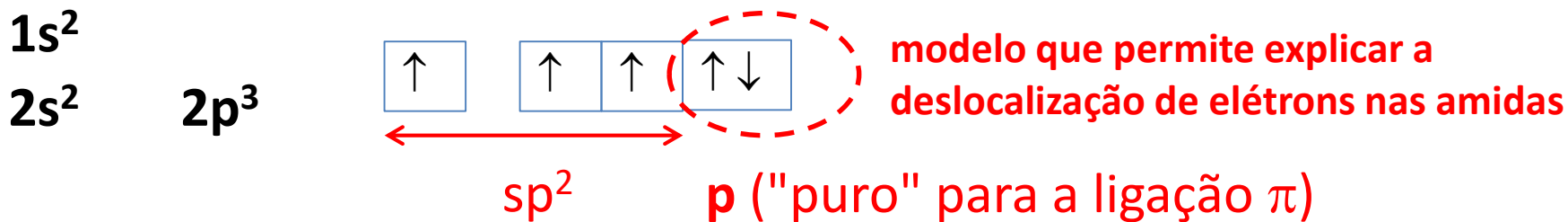


Como explicar este fenômeno com base nos elétrons de orbitais “p”

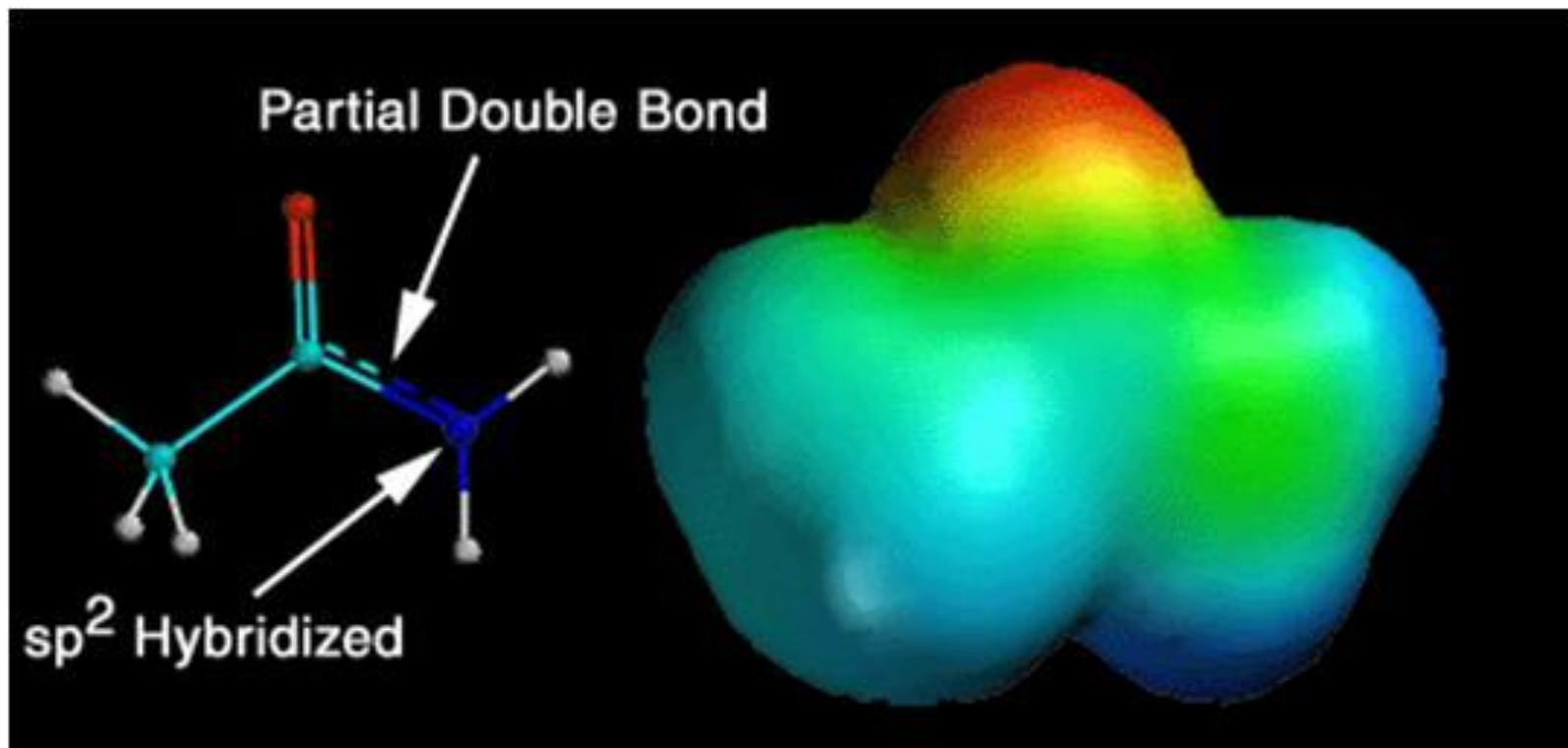
Distribuição de elétrons no **Carbono**:



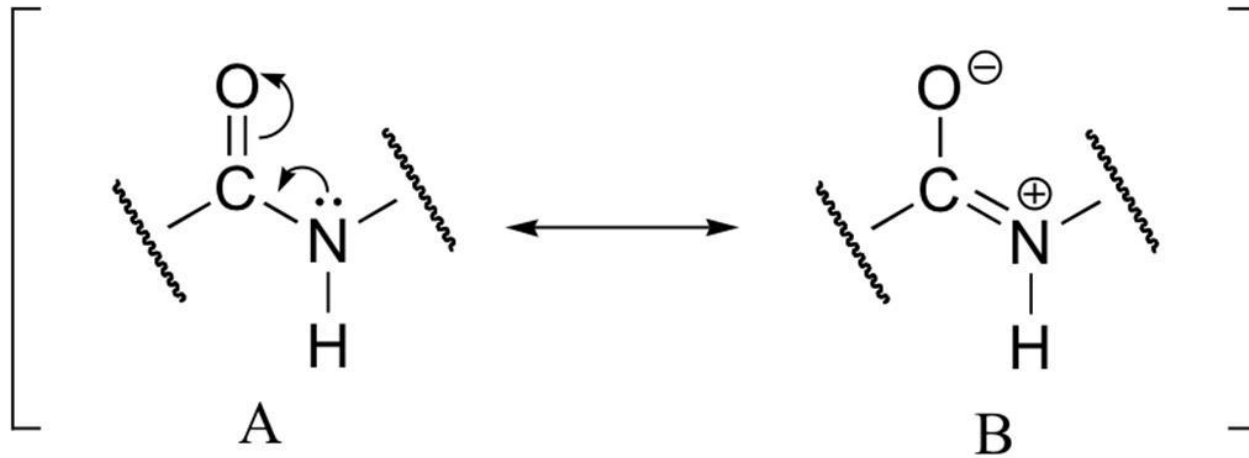
Distribuição de elétrons no **Nitrogênio**:



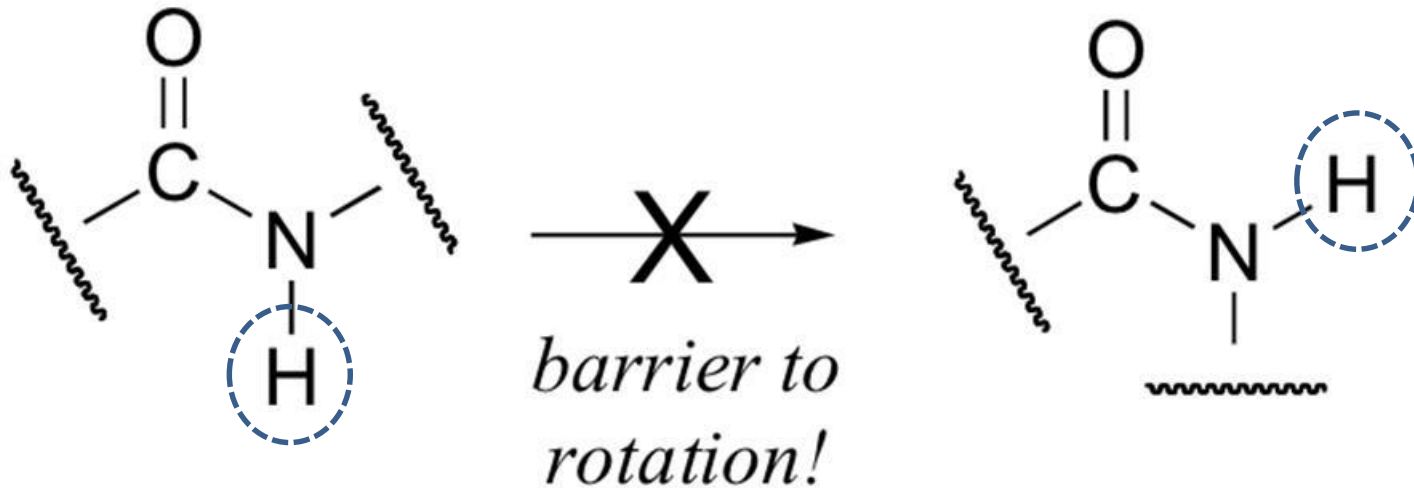
Heat map para a densidade eletrônica numa amida

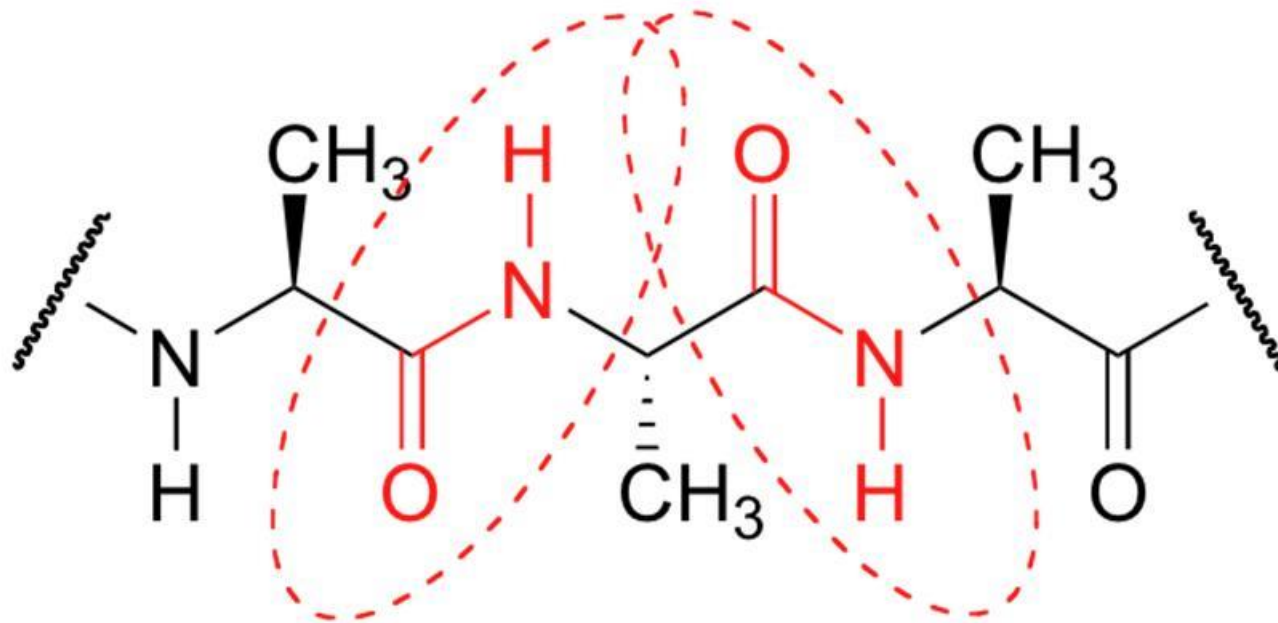


Implicações para uma ligação peptídica e a estrutura tridimensional das proteínas



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





peptide bonds in a polypeptide

Pense: Próxima aula

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