

# TP Química Orgânica

## 1. a) 3,3,4 - Trimetilhexano

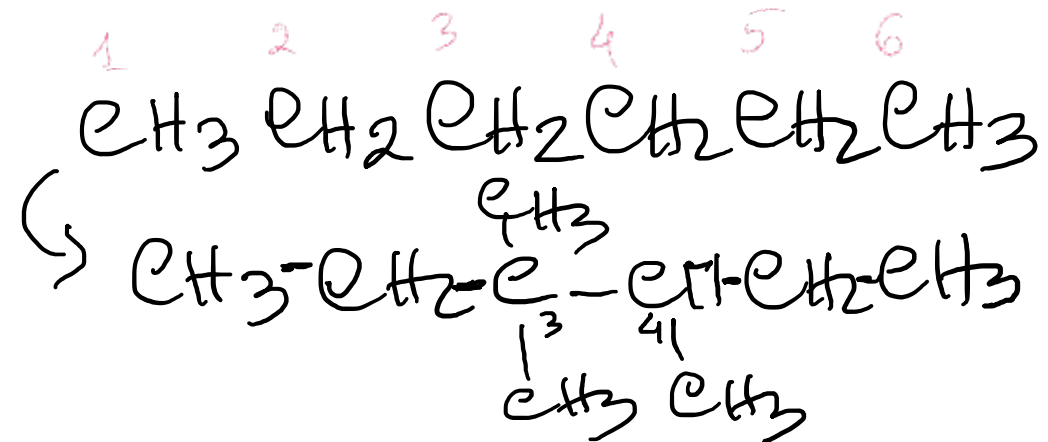
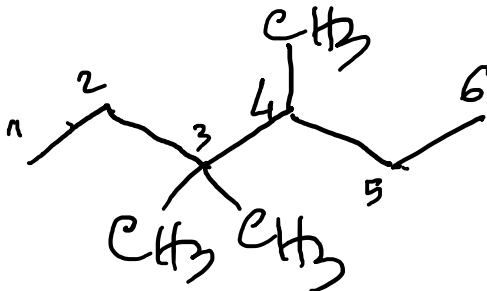
- ❖ Temos um alcano com 6 átomos de carbono, C6
- ❖ Trissubstituído, tem 3 grupos metilos nas posições 3, 3 e 4

1º Vamos escrever a cadeia em C6

2º numerar a cadeia

3º introduzir os substituintes

ou de forma simplificada:

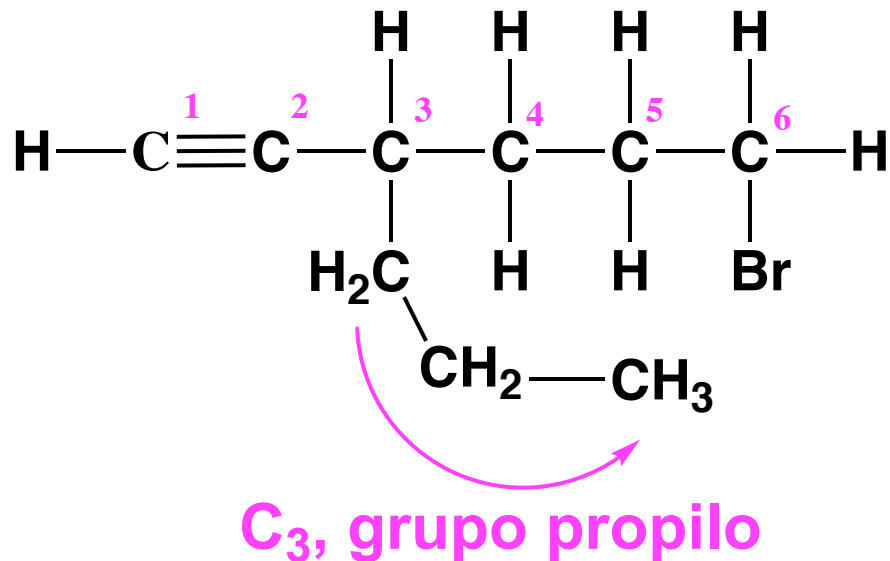


### c) 6-bromo-3-propilhexino

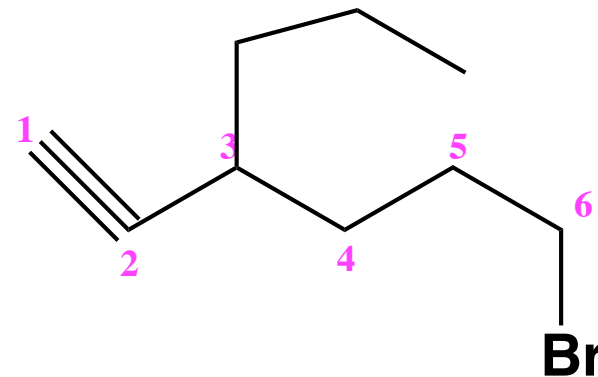
1º Hexino, temos uma cadeia em C6, mas tem uma terminologia **ino**, logo temos uma ligação tripla

2º Quantos substituintes tem? Temos dois substituintes, o bromo e o propilo e em que posições? O Br está no C<sub>6</sub> e o H<sub>3</sub>CCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub> está no C<sub>3</sub> e tem uma ligação tripla em C<sub>1</sub>

3º Não esquecer que se escreve por ordem alfabética!



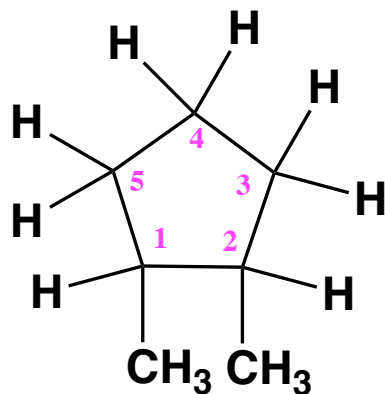
ou de forma simplificada em que omitem os átomos de H



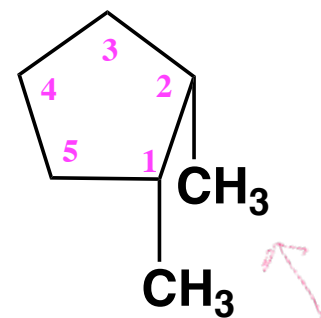
## b) *cis*-1,2-dimetilciclopentano

1º Este composto é um ciclo-alcano com 5 átomos de C, C5

2º temos dois substituintes iguais nas posições C1 e C2, temos um **dimetilo**



ou de forma simplificada em  $\bar{5}$  se omitem os átomos de H



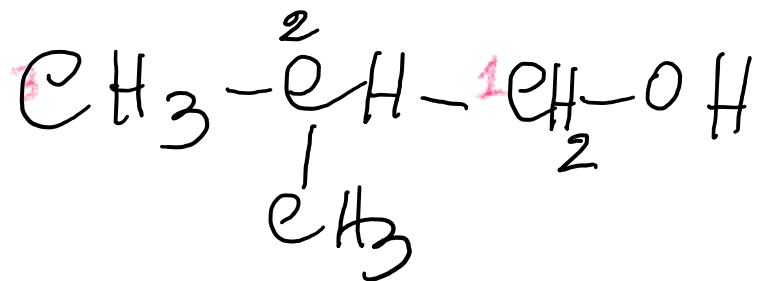
estes dois grupos metilo estão para o mesmo lado, logo temos a designação *cis*

## d) 2-metilpropanol

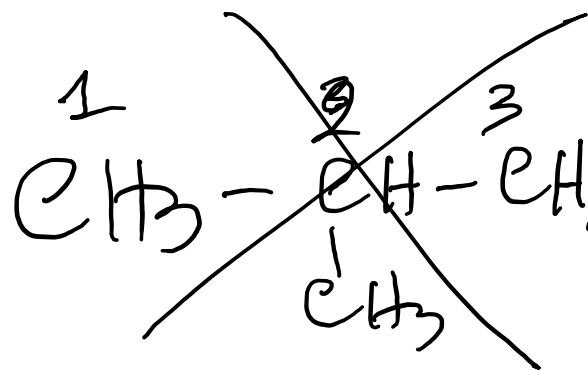
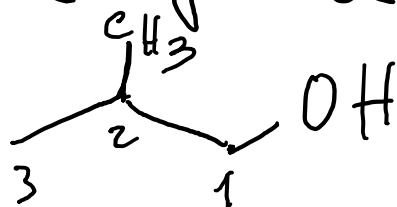
1º Estamos na presença de um álcool – terminação **ol**

2º propanol temos uma cadeia em C3

3º tem um substituinte metilo na posição C2



ou de forma simplificada



porque o álcool que é o grupo funcional é o que tem a menor cadeia menor.

Quando no nome não vem indicado a posição é a posição do C1.

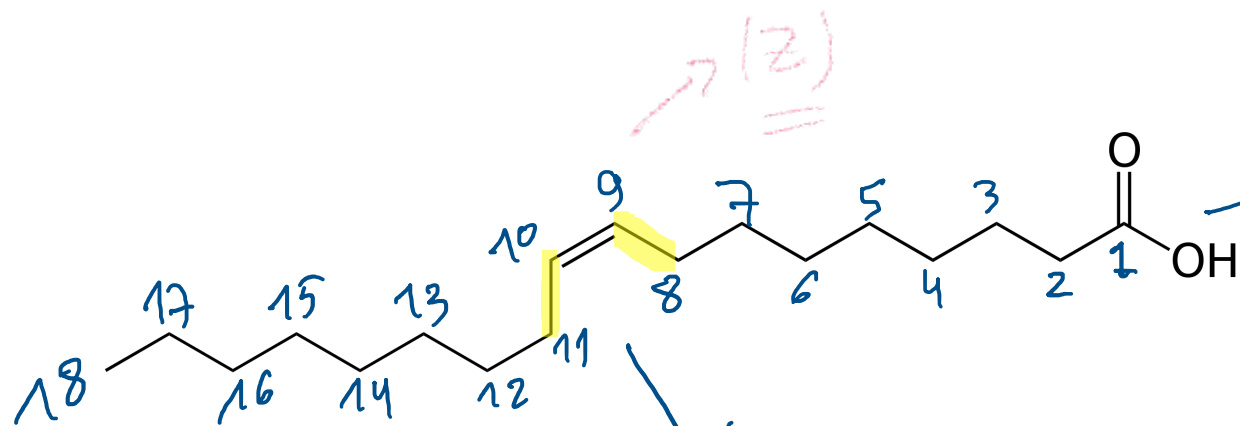
e) **Ácido (9Z)-octadecenóico**

1º Estamos na presença de um ácido carboxílico, a regra da IUPAC usa a terminação óico, octadecano tem 18 átomos de carbono;

2º tem uma ligação dupla porque é deceno e onde é a ligação dupla?

3º (9Z) indica a posição 9 e o facto de ser Z?

geometria Z.

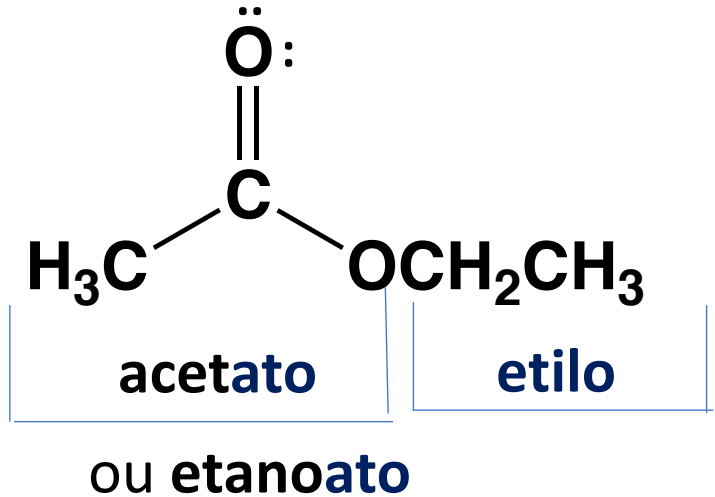


ácido  
carboxílico  
(óico)

esta ligação dupla é (Z) o equivalente  
a cis  
e é na posição 9

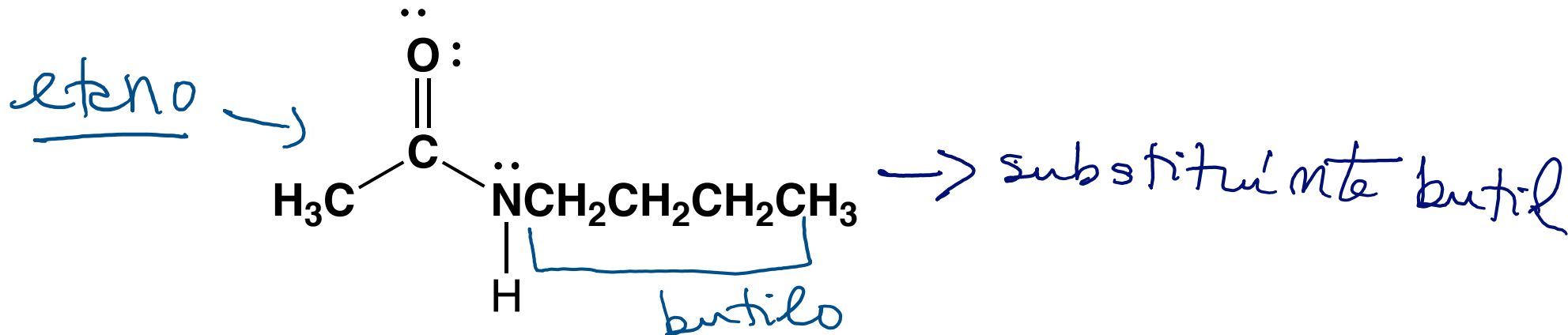
## f) Acetato de etilo

Temos um grupo funcional éster → **ato de ilo**



## g) *N*-butiletanamida

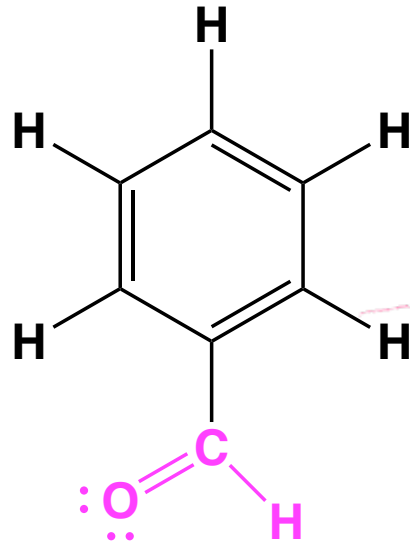
1º Como a regra da IUPAC indica temos um grupo funcional amida, terminação **amida**; 2º temos um **etano logo C2**



## h) Benzaldeído

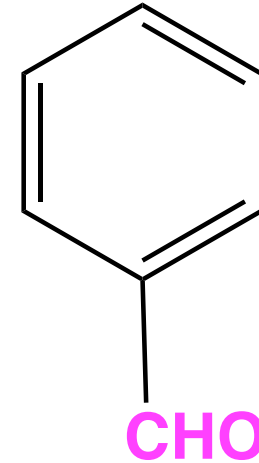
Grupo funcional – aldeído

↓  
benzeno



benzeno  
→  
aldeído

ou



## i) Bromobenzeno

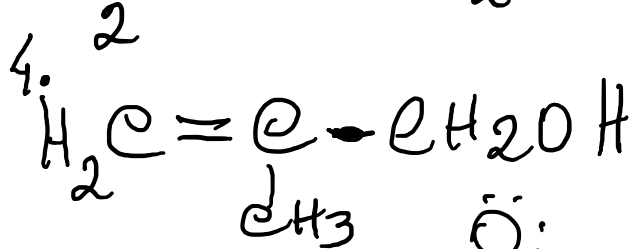
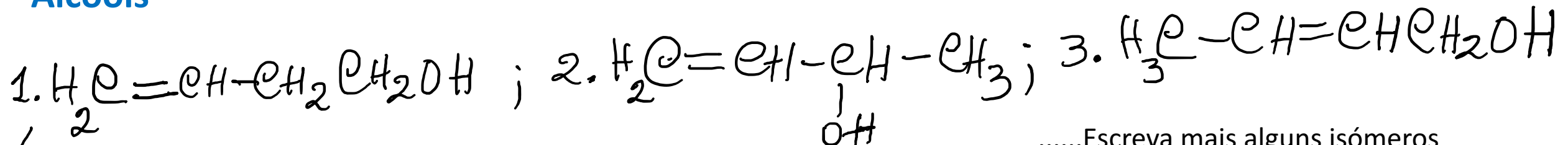
temos um  
benzeno substituído



## 2) Isômeros Constitucionais de C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O

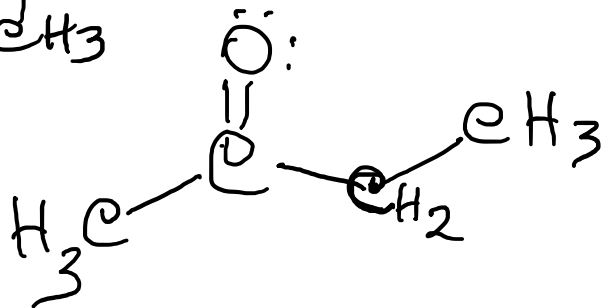
Diferentes modos como os átomos de C, H e O se ligam entre si,  
(portanto pensamos que grupos funcionais têm o átomo de oxigênio???)

### Álcoois

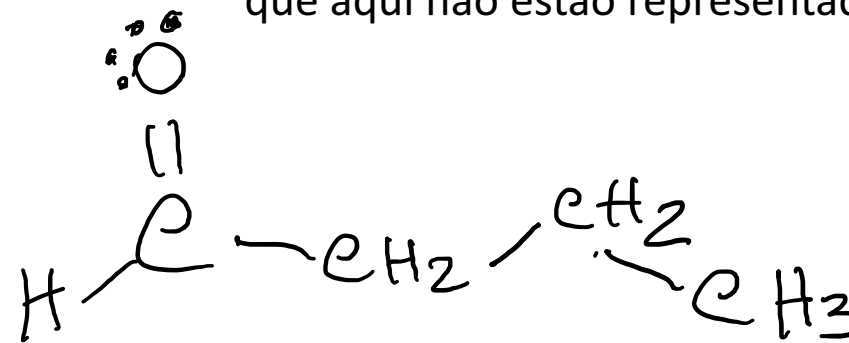


.....Escreva mais alguns isômeros  
que aqui não estão representados!

### Cetonas



### Aldeído



### Éteres lineares

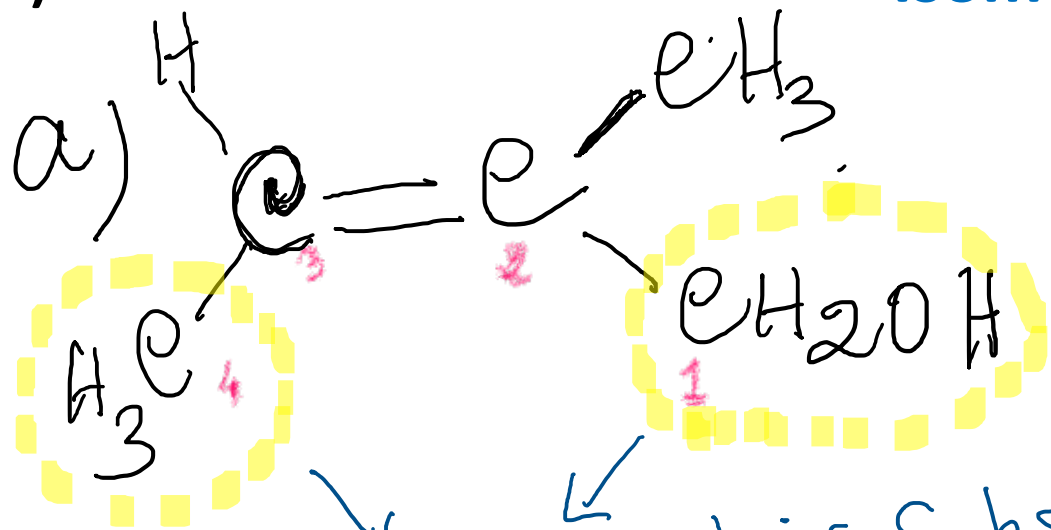






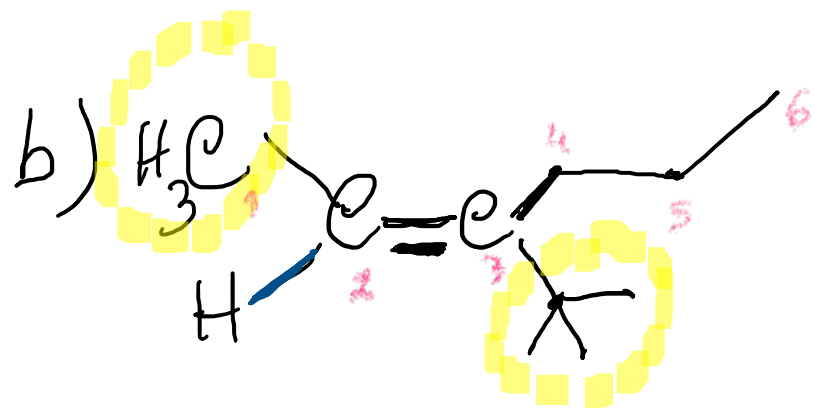
4)

## Isômeros Geométricos

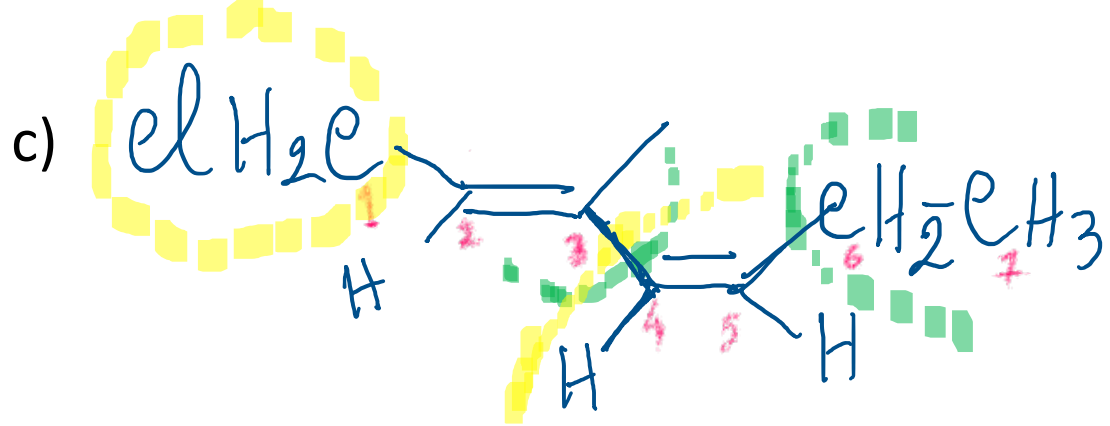


As regras de Cahn-Ingold-Prelog (CIP), estabelecem a prioridade dos substituintes unidos a um átomo, habitualmente **carbono**. Este conjunto de regras serve para designar de forma inequívoca a configuração, a disposição espacial, de estereoisômeros, tais como **enantiômeros** e **diastereoisômeros** ou no caso dos alcenos a notação **Z/E (cis/trans)**.

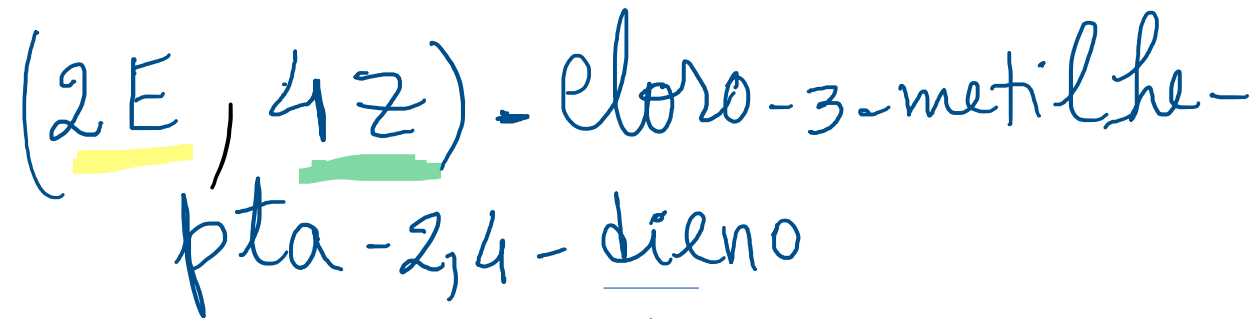
do mesmo lado  $\Rightarrow$  são os dois substituintes mais pesados estão  $\Rightarrow$  temos um isômero Z (cis)



Os dois substituintes mais pesados estão de lados opostos  $\Downarrow$  E (trans)



Como vemos?  
Ao redor do C2 e C3 como estão os substituintes?



**di** indica que temos 2 ligações duplas, portanto temos que definir como estão Posicionadas

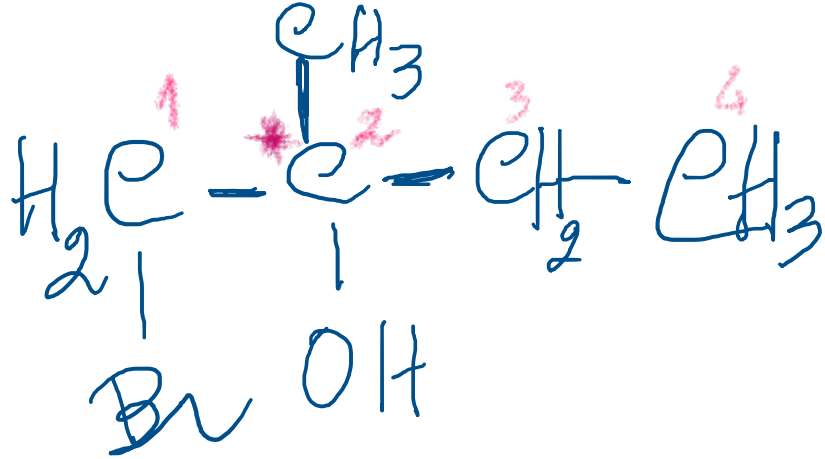
Usamos sempre as regras de **Cahn-Ingold-Prelog (CIP)**, estabelecem a prioridade ao redor de cada ligação dupla



Como vemos?  
Ao redor do C3 e C4 como estão os substituintes?

Ácido (3Z)-4-aminobut-3-enóico

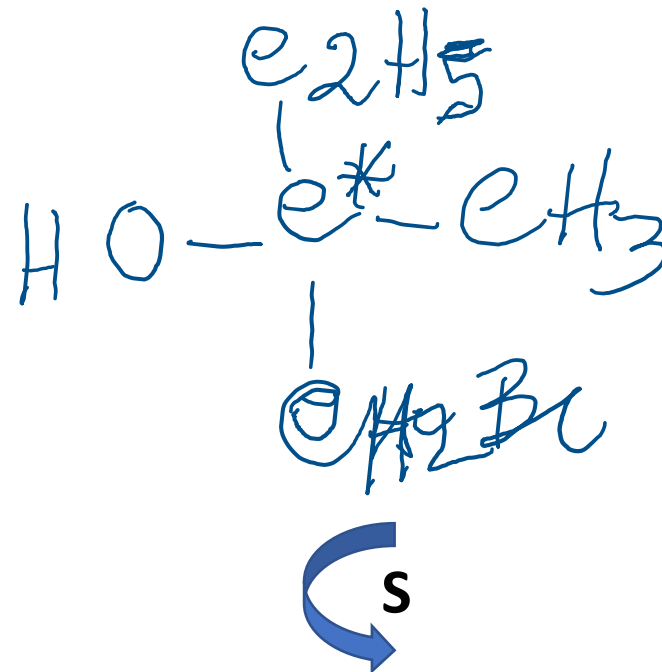
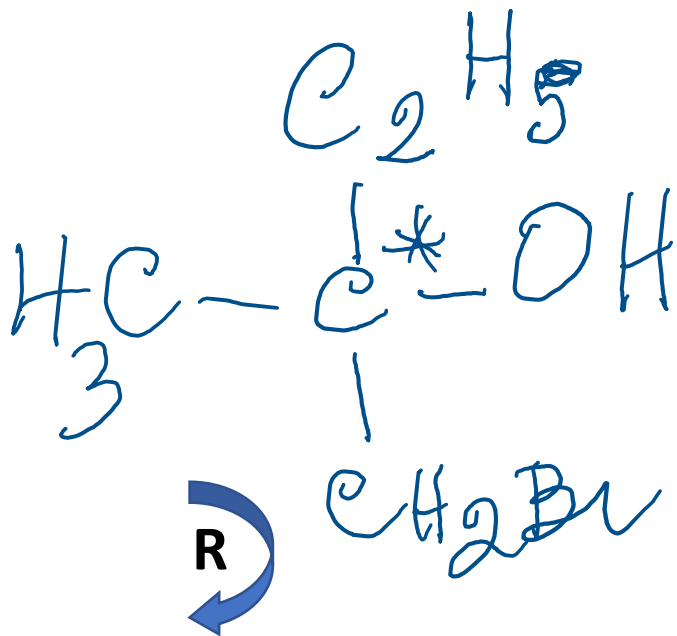
## 5) 1-bromo-2-metilbutan-2-ol



Esta molécula tem 1 centro estereogénico ou 1 Carbono quiral (indicado com asterisco) ou carbono assimétrico

portanto temos estereoisómeros,  $2^n = 2^1 = 2$  ou seja 2 enantiómeros

estabelecer a **Regra de Prioridade:** **ESPELHO**



1 par de enantiómeros

# Regras de Cahn-Ingold-Prelog

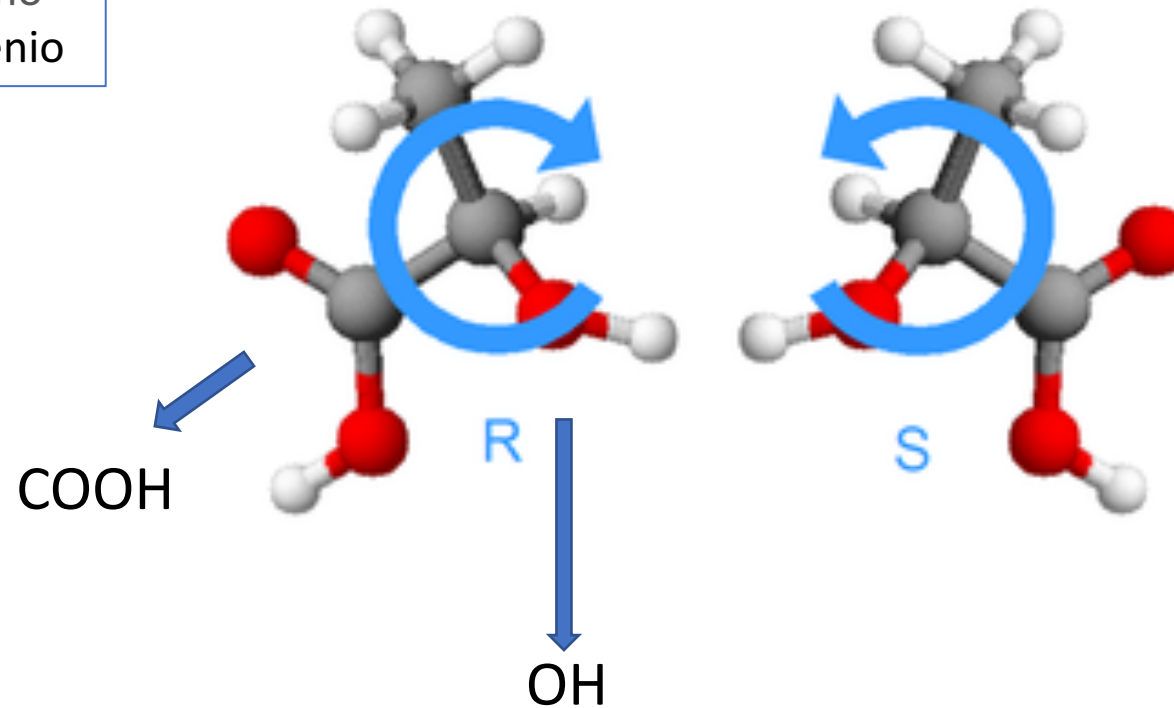
## Regras de Prioridade

(são de acordo com o nº atómico dos átomos)

**Vermelho** - átomo de **Oxigénio**

**Cinzento** - átomo de **Carbono**

**BRANCO** - átomo de **hidrogénio**

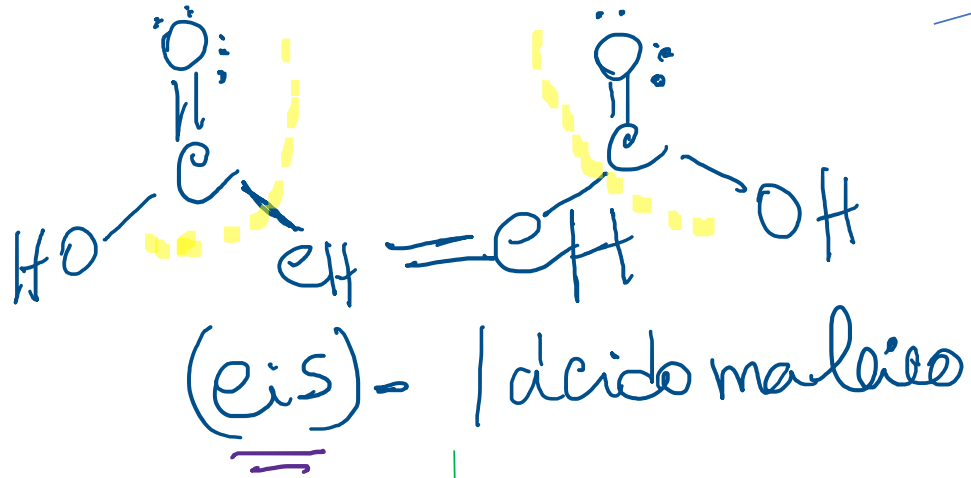


As **regras de Cahn-Ingold-Prelog (CIP)**, estabelecem a prioridade dos substituintes unidos a um átomo, habitualmente **carbono**.

Este conjunto de regras serve para designar de forma inequívoca a configuração, a disposição espacial, de estereoisómeros, tais como **enantiómeros** e **diastereoisómeros** ou no caso dos alcenos a notação **Z/E (cis/trans)**.

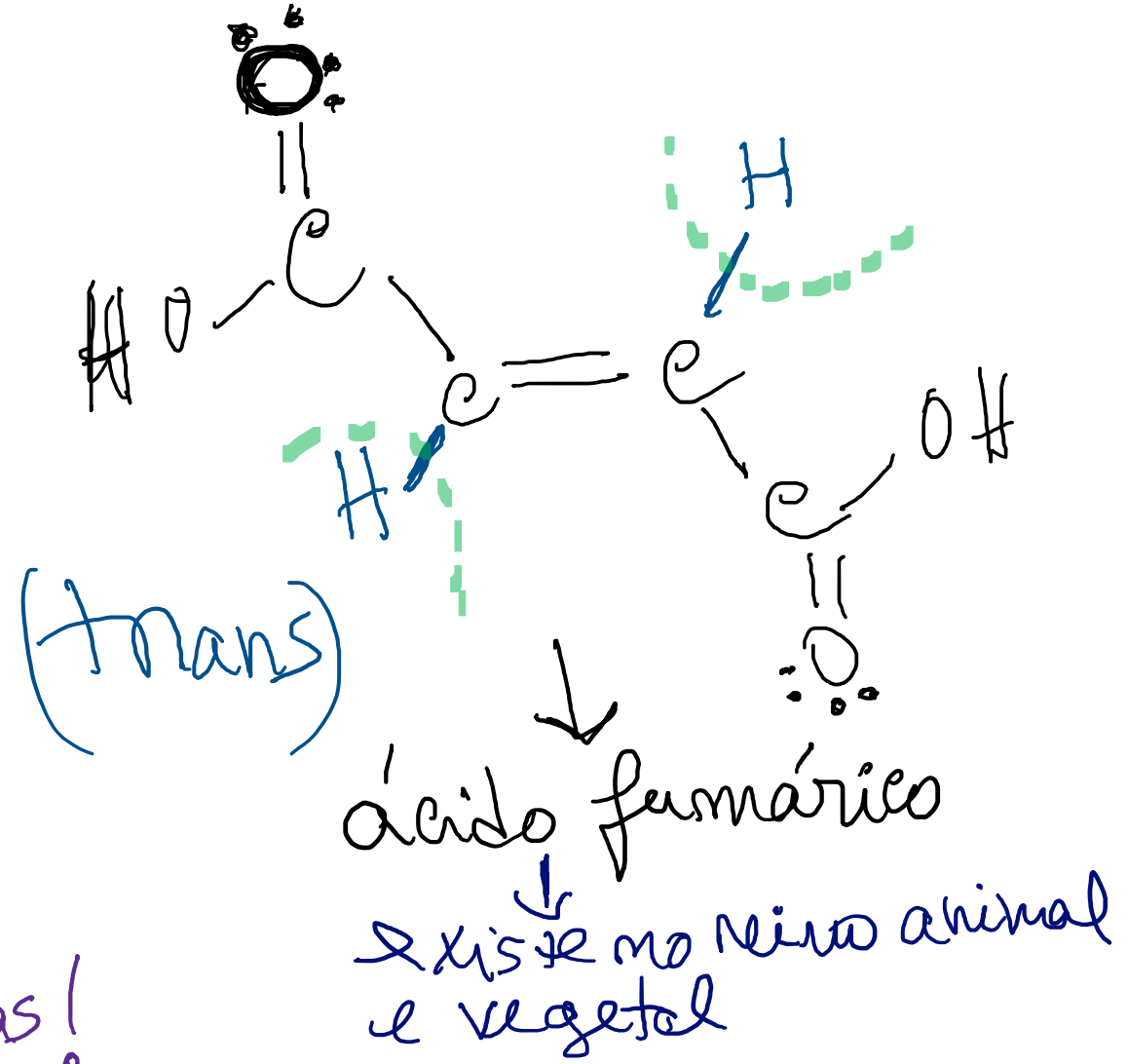
## 5) Ácido butenodióico

## Isómeros Geométricos



Desidrata facilmente  
porque os 2 grupos  $\text{CO}_2\text{H}$   
estão do mesmo lado

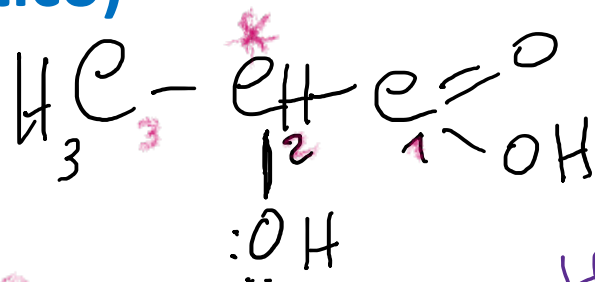
→ Os ácidos málico e fumárico  
apresentam propriedades distintas!



5 c)

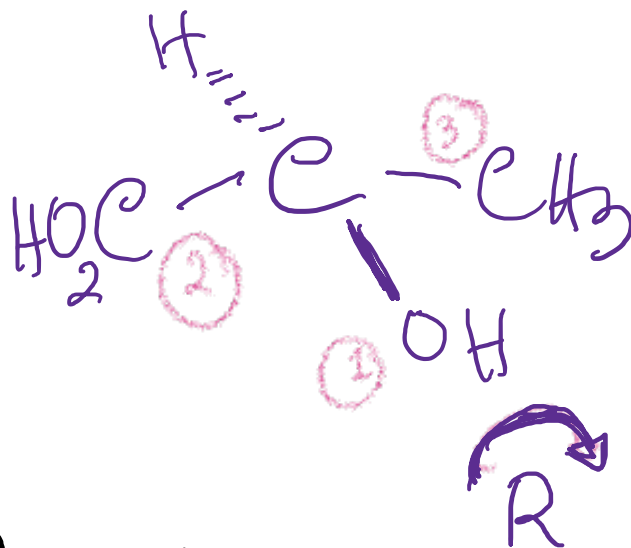
## Ácido 2-hidróxipropanóico (ácido láctico)

Terminação óico, logo temos um ácido carboxílico



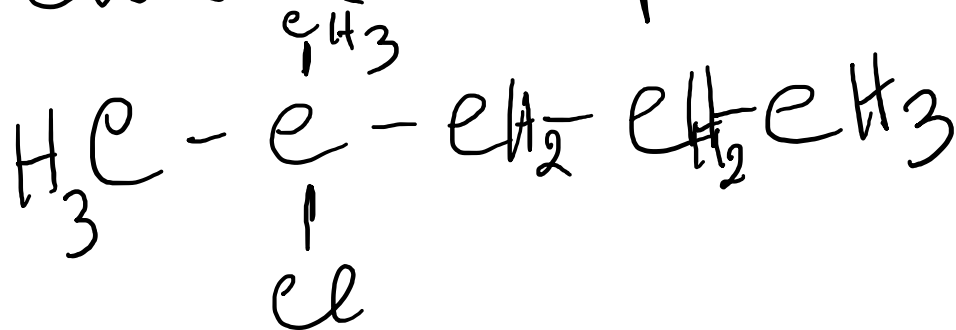
**1 Centro estereogénico** ou **1 Carbono quiral**  
(ou carbono assimétrico)

$$2^n = 2^1 = 2 \text{ enantiómeros}$$



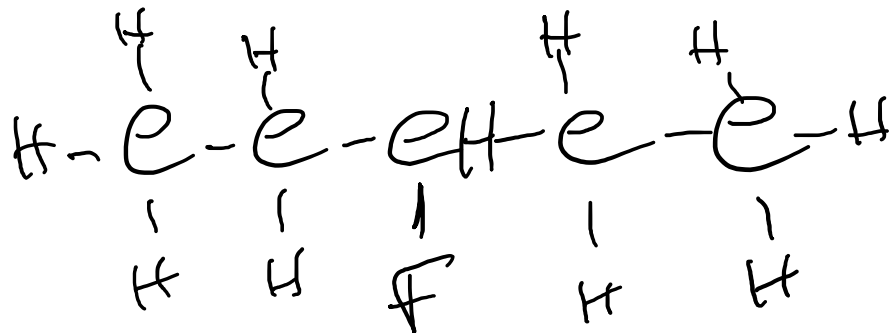
5 d)

2-cloro-2-metilpentano

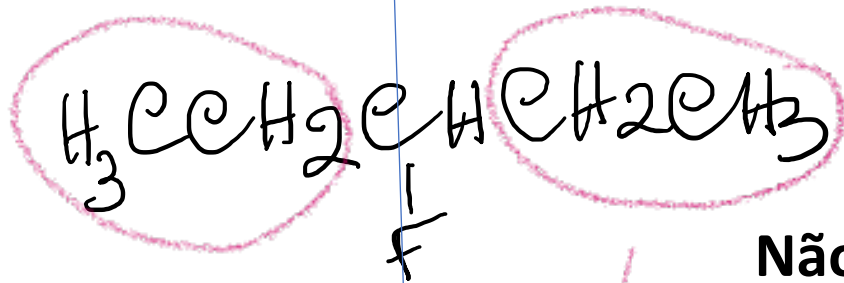


**Não tem isómeros**

### e) 3-fluoropentano



ou

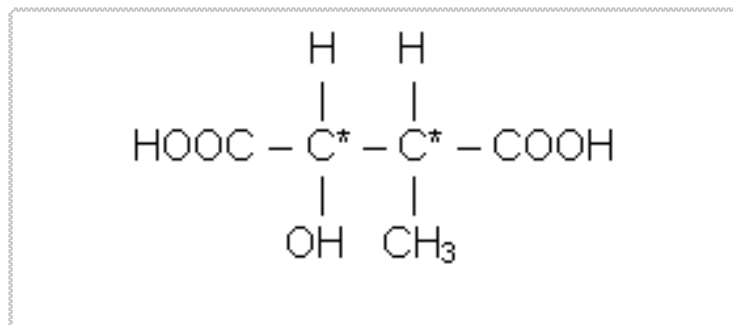


**Não existe um centro estereogénico;**  
não existe Carbono quiral; não existe carbono assimétrico  
porque temos dois grupos iguais, há simetria na molécula!

552 grupos iguais

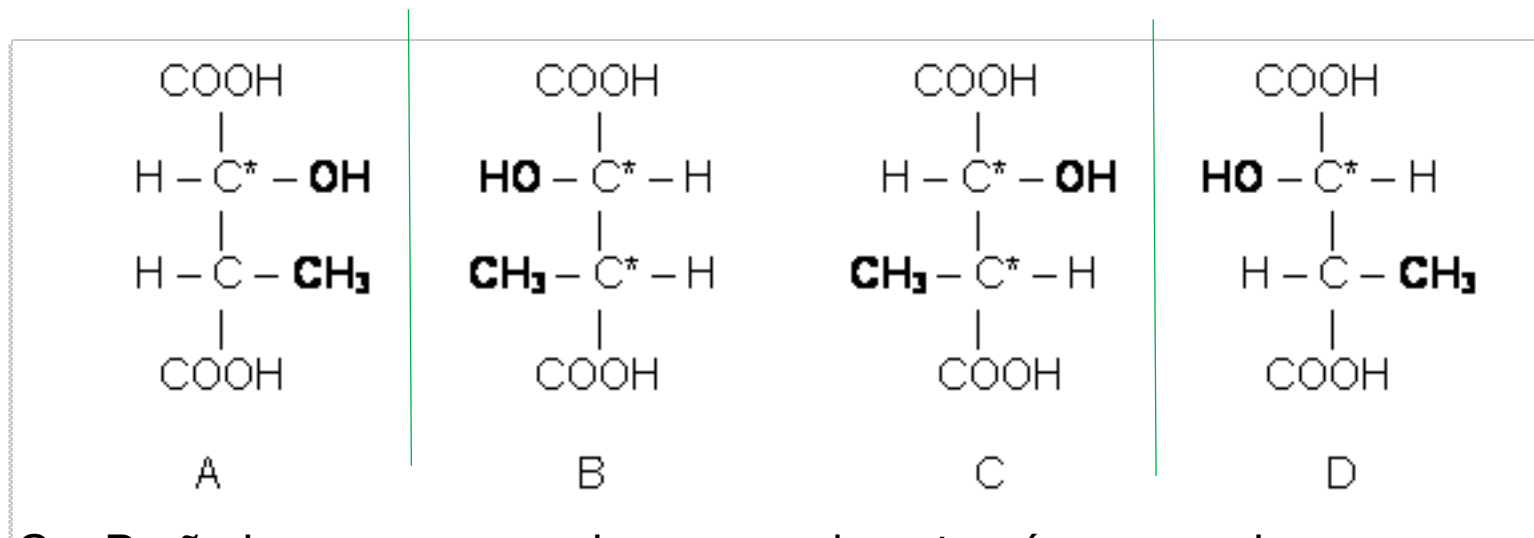


## Ácido 2-hidróxi-3-metilbutanodióico



Neste composto, temos dois carbonos assimétricos (asteriscos) e diferentes entre si.

Este composto apresenta quatro isómeros distintos entre si, que podem ser representados desta forma, através das **projeções de Fischer**:

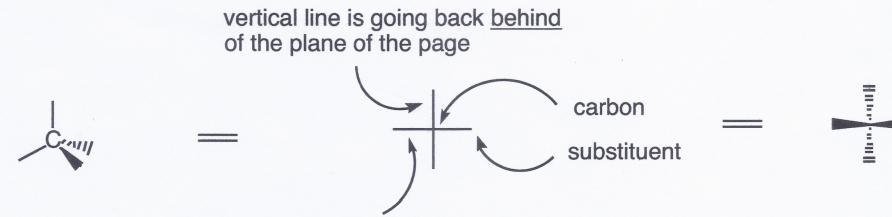


Observe que A e B; C e D são imagens especulares uma da outra, é como se houvesse um espelho na frente de A e de C são **enantiómeros ou isómeros óticos**

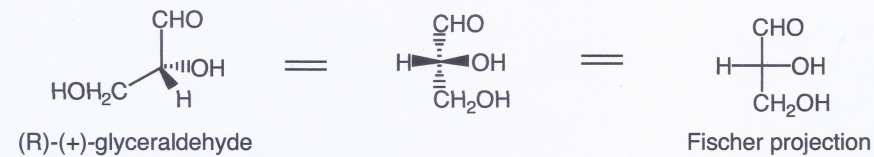
Neste caso são A e C; A e D; B e C; B e D são **diastereoisómeros**, têm propriedades distintas e não são isómeros óticos

## Fischer Projection

representation of a 3D molecule as a flat structure where a tetrahedral carbon is represented as two crossed lines.

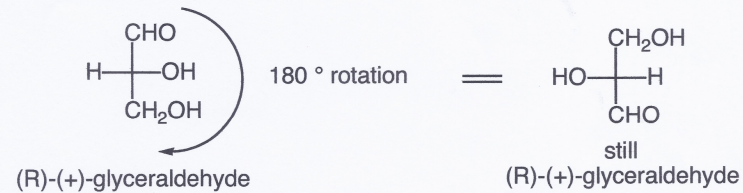


horizontal line is coming out  
of the plane of the page

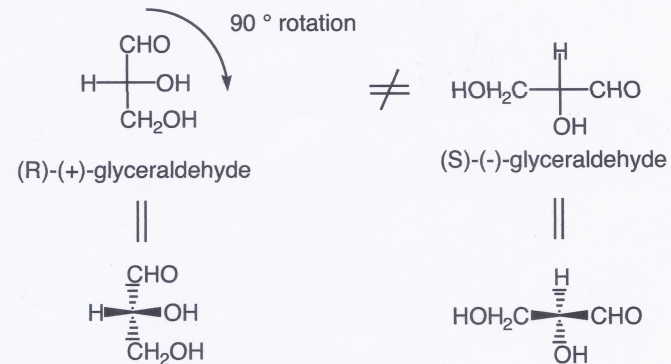


Manipulation of Fischer Projections:

1. Fischer Projection can be rotated by  $180^\circ$  only!



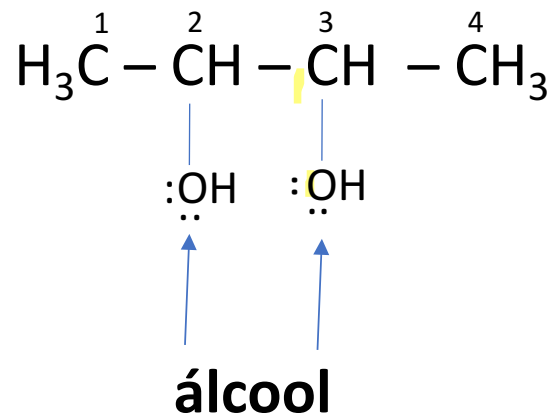
Rotation by  $90^\circ$  or  $-90^\circ$  ( $270^\circ$ ) invert the stereochemistry



Because of the convention of the Fischer Projection (i.e., the vertical lines are going back and the horizontal lines are coming forward) the  $90^\circ$  rotated Fischer projection is actually the enantiomer of the original

These two compounds are enantiomers

## 6. 2,3-Butanodiol



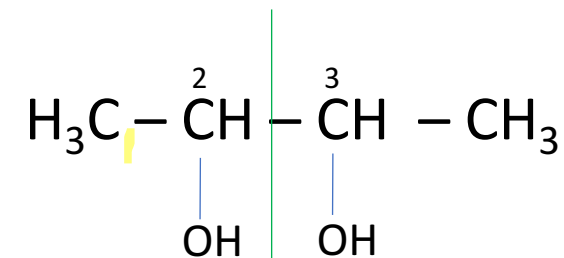
**ol** terminação do grupo funcional **álcool** e tem dois grupos álcool assim temos **diol**  
**butano** logo tenho uma cadeia em **C4**

Nos Carbonos 2 e 3 temos dois centros estereogênicos portanto temos 1 par de enantiômeros : **(2R, 3R)** e **(2S, 3S)**, ou seja **(2R, 3R)**-2,3-butanodiol e **(2S, 3S)**-2,3-butanodiol

**(2R, 3S)** e **(2S, 3R)**

Temos **1 meso** composto

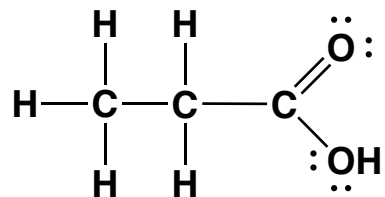
Porquê? Desenhar as projeções de Fischer



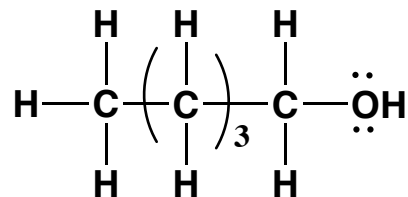
Total temos 1 par de enantiômeros, **(2R, 3R)** e **(2S, 3S)** e 1 meso composto porque se tem um plano de simetria ao rodar a ligação C2 – C3

7) O que é o ponto de ebulição de um líquido? Com o que é que se relaciona?

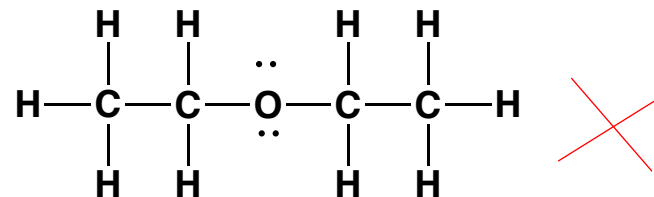
a) Ácido propanóico



b) Pentanol

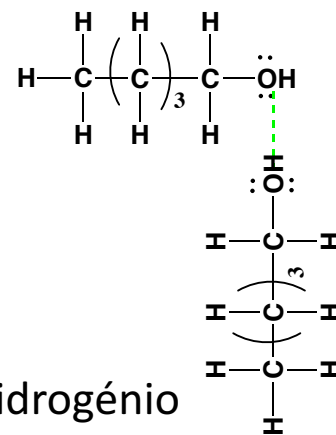
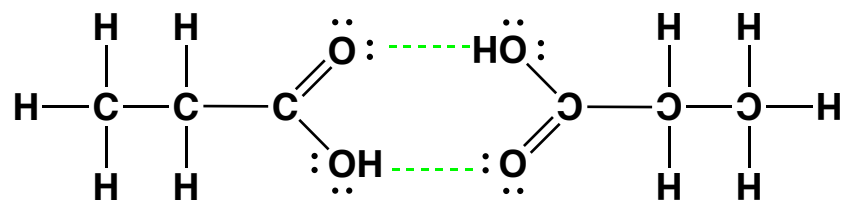


c) Etóxietano (éter dietílico)



Não forma ligações por ponte de hidrogénio

Relacionar com o tipo de **interação intermoleculares**



Só formam ligações de H :

N-H

O-H

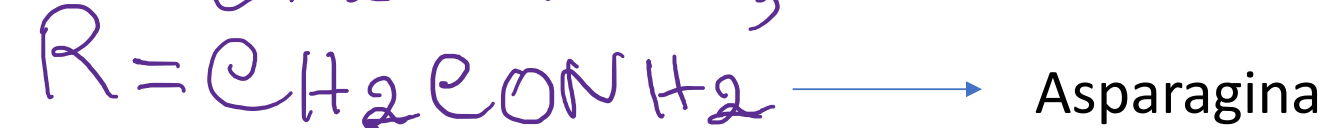
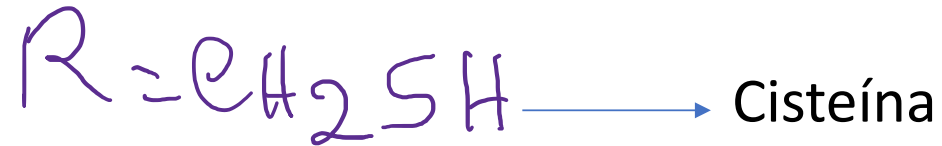
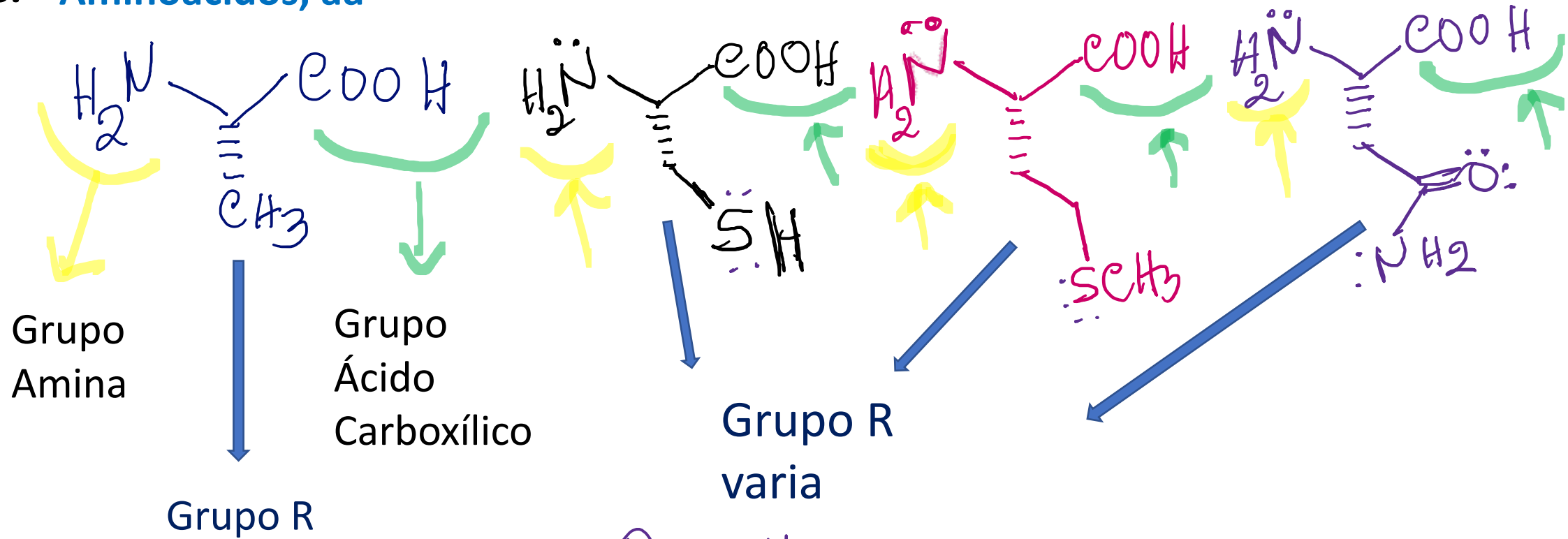
S-H

H-F

H-Cl.....

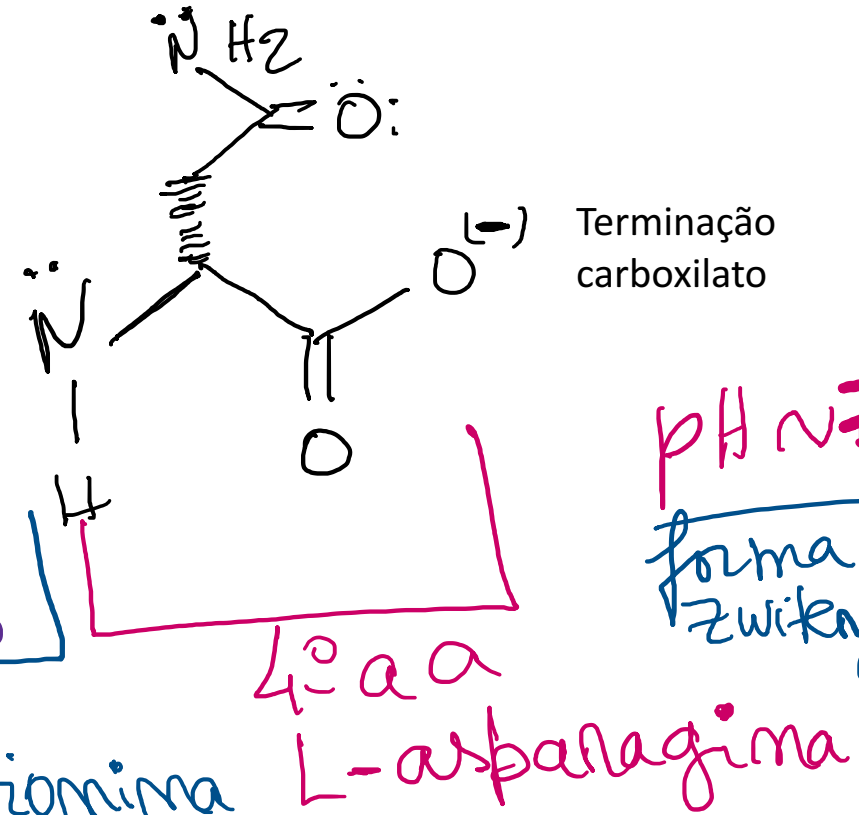
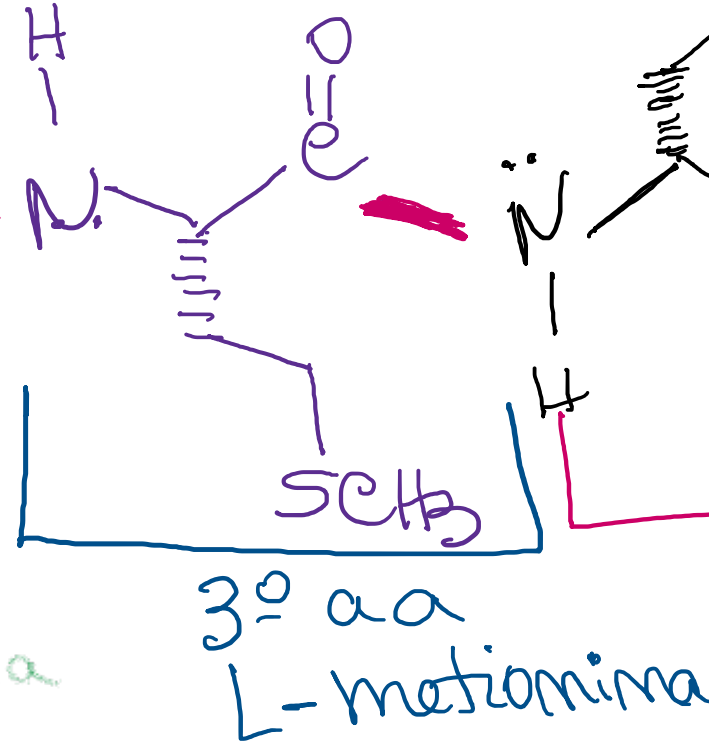
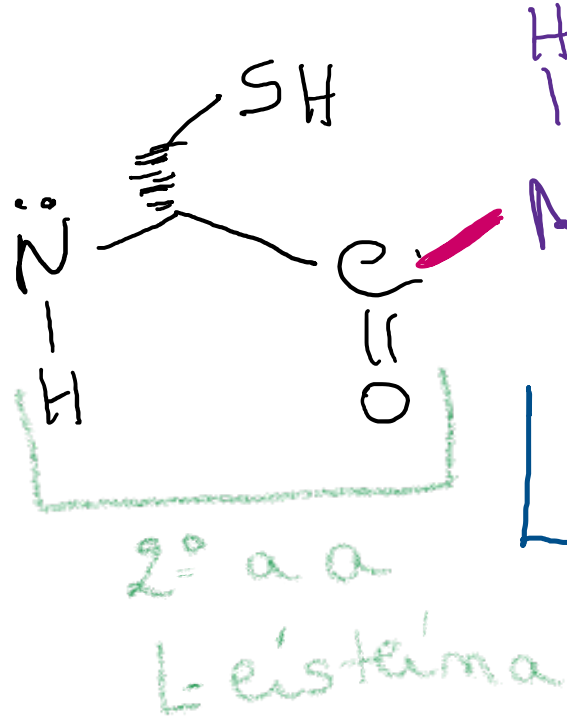
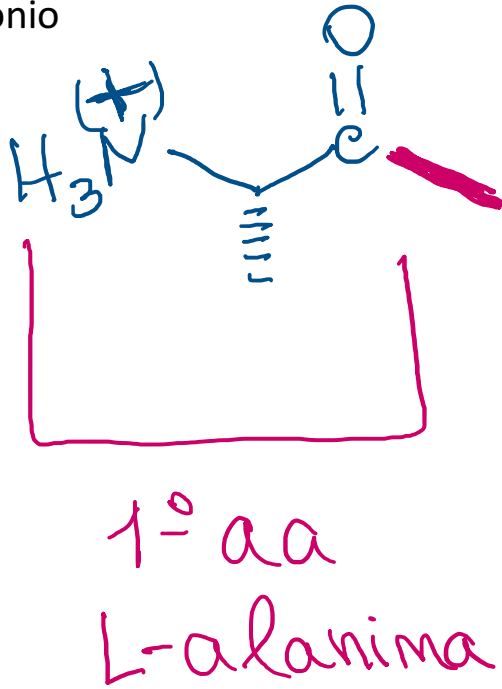
a) para b) diminui o nº de ligações por pontes de hidrogénio

## 8. Aminoácidos, aa



# 8 b. Peptídeo 4aa: Ala-Cis-Met\_Asn

Terminação Amônio



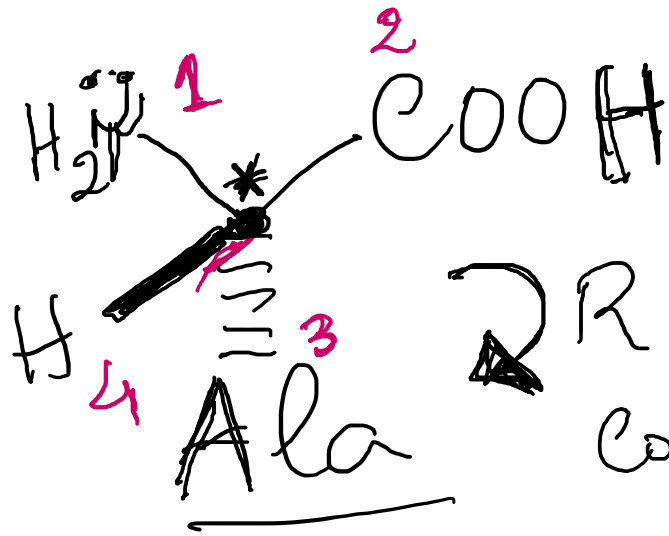
Terminação carboxilato

pH ~ 7,4  
forma zwitteriônica

ligação semelhante corresponde à ligação peptídica

amida e sempre trans  
esta ligação é uma ligação covalente

8.2.



Configuração absoluta  
tem que se seguir a Regra  
de prioridade (CIP)

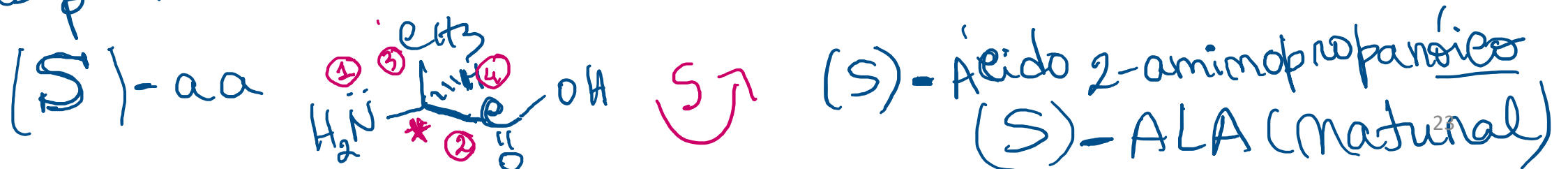
contudo o átomo de H está para a frente  
logo inverte



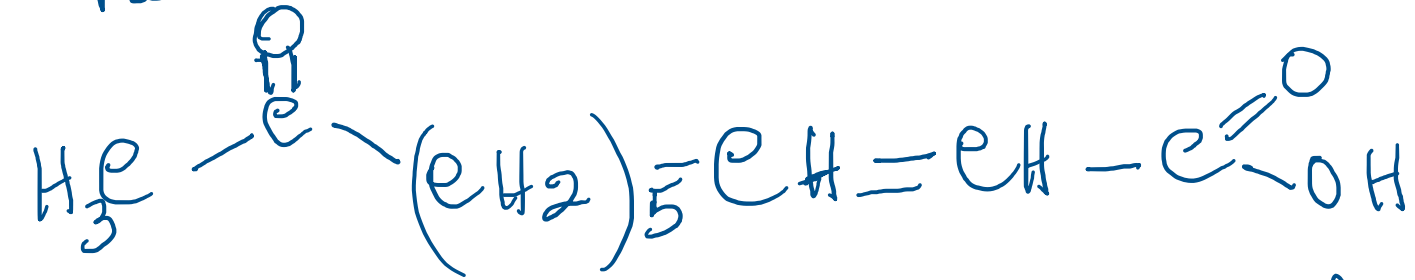
aa <sup>\*</sup>Carbono assimétrico (C $\alpha$ )

excepto a glicina! é quiral

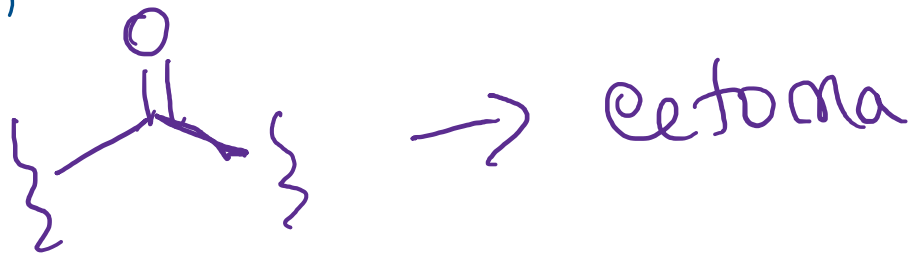
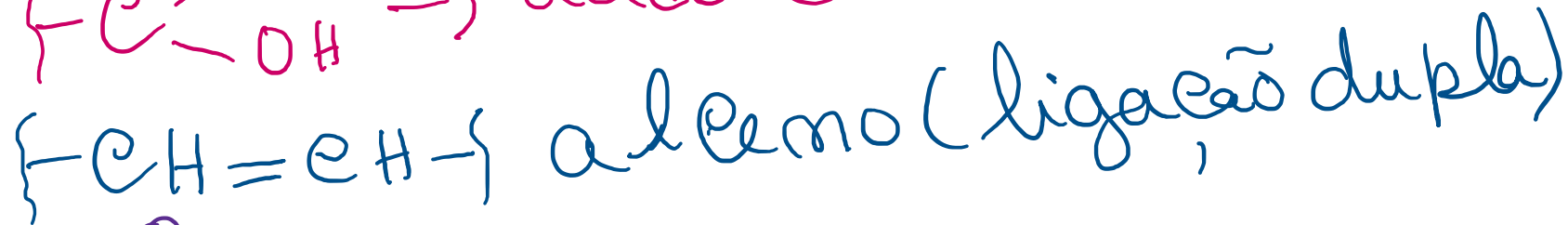
Nas proteínas existem aa sempre na forma L ou



9. Fenomeno:



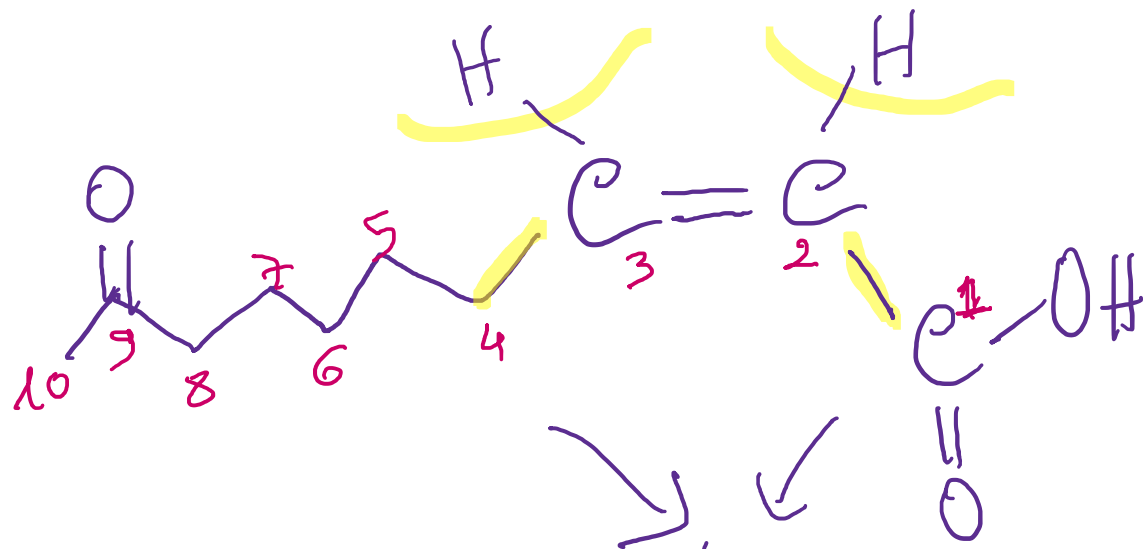
a) Funções orgânicas ou grupos funcionais:



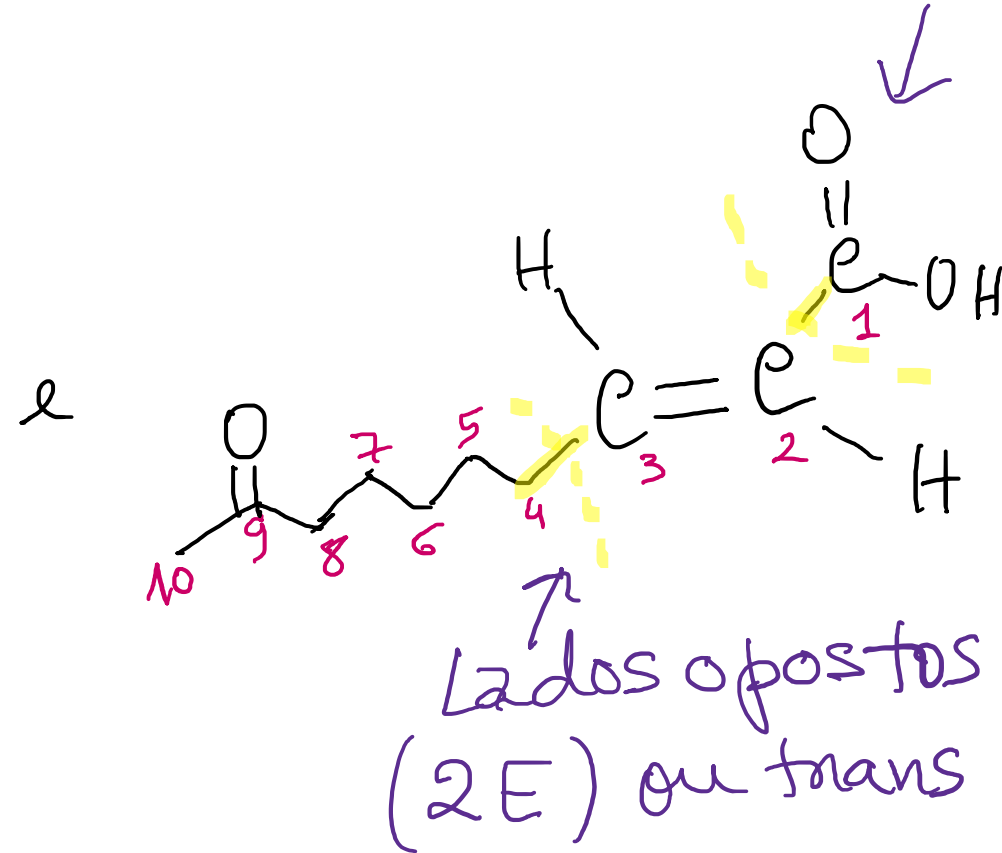
b) Isomeria Geométrica, ao redor da ligação dupla



# c) Isômeros geométricos

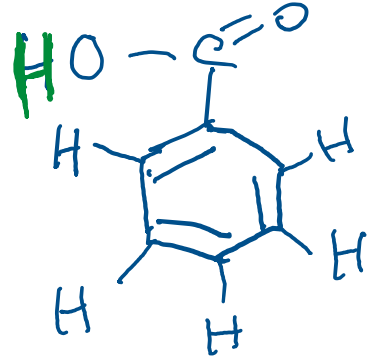


o grupo ácido e a cadeia carbonada estão para o mesmo lado cis ou (Z)  
(2Z)

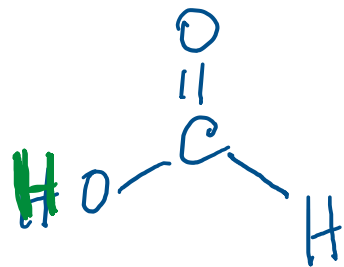


10.  $pK_a = -\log K_a$

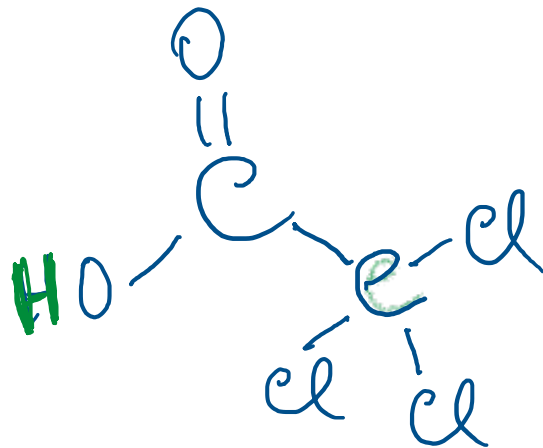
ácido benzoico



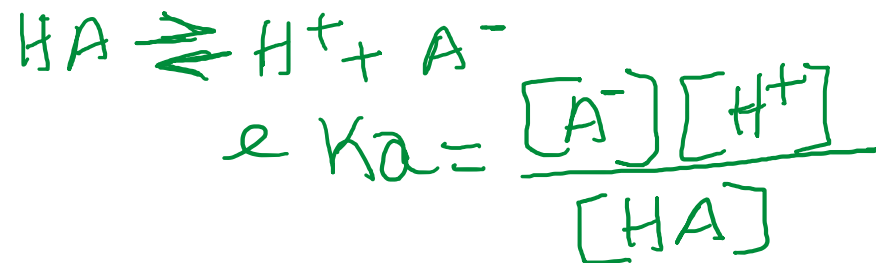
( $pK_a = 4,2$ )



( $pK_a = 3,8$ )



( $pK_a = 0,6$ )



ácido mais forte!

↑  
aumento de força do ácido

