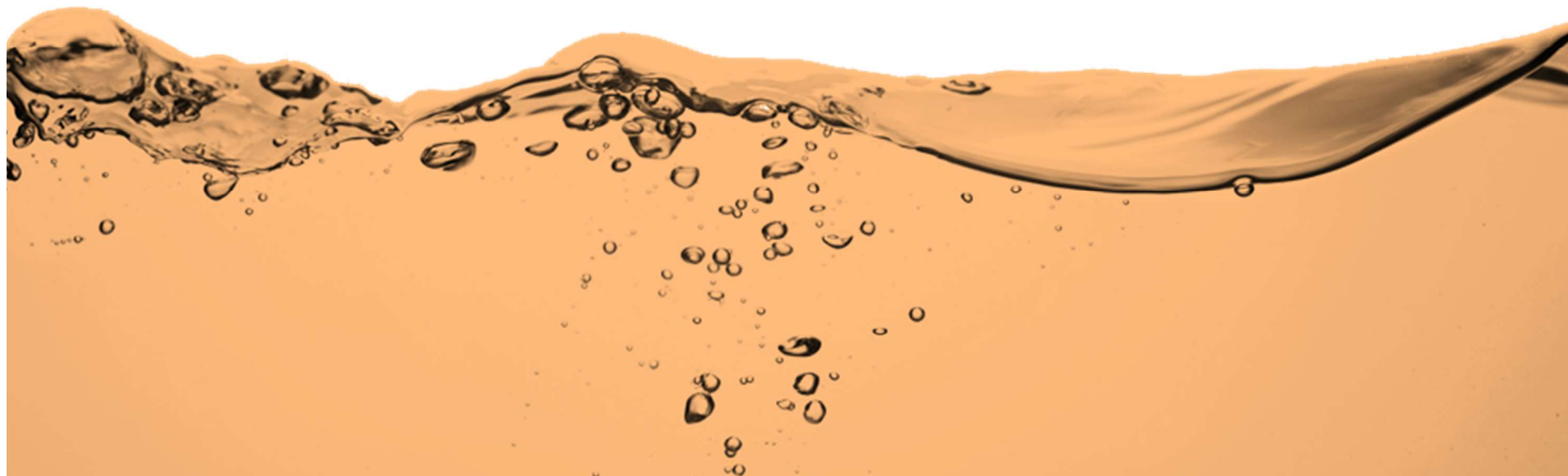


Representação de Moléculas Orgânicas

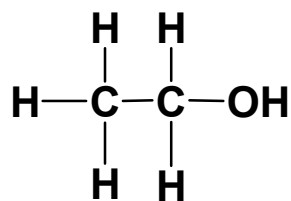


Existem diversas formas para representar compostos orgânicos. As formas mais usuais e rápidas de os representarmos no papel é através de uma **fórmula molecular**, de uma **fórmula estrutural plana**, de uma **fórmula estrutural simplificada ou condensada** ou de uma **fórmula de traços**.

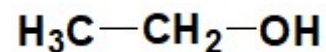
Vejamos o caso da molécula do etanol:



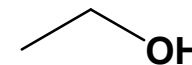
fórmula molecular
(fórmula condensada)



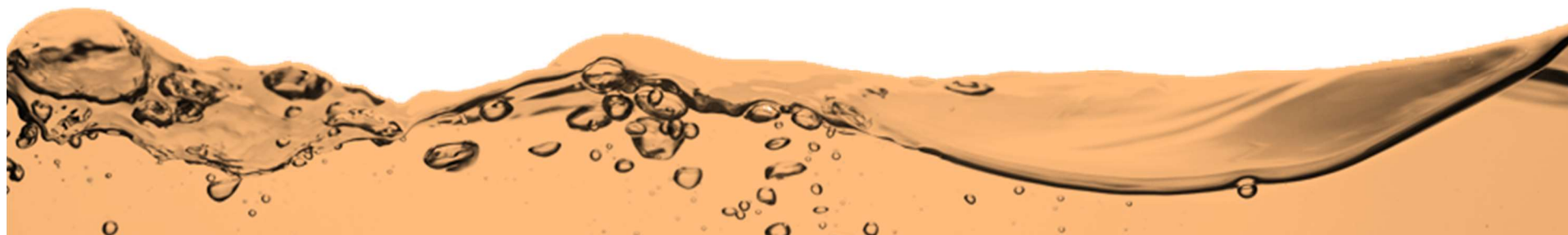
fórmula estrutural plana
(fórmula de Couper)



fórmula estrutural plana
simplificada ou condensada



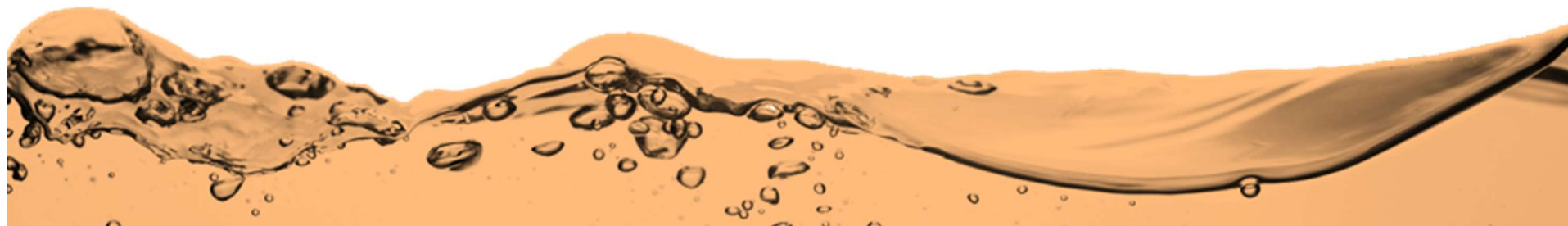
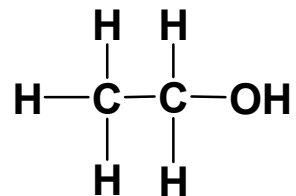
fórmula de traços



A **fórmula molecular** de um composto orgânico indica o número de átomos de cada elemento que compõe a molécula, bem como a proporção entre eles.

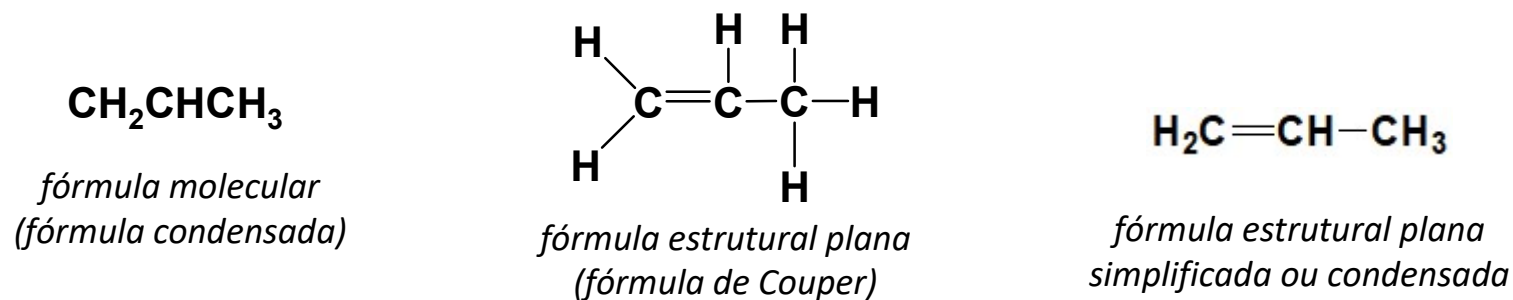
Voltando ao exemplo do etanol, a sua fórmula molecular pode ser expressa por **C₂H₆O**. Significa que cada molécula de etanol é formada por dois átomos de carbono e seis átomos de hidrogénio e um átomo de oxigénio. Podemos detalhar um pouco mais a sua representação através da representação da fórmula condensada, **CH₃CH₂OH**. Nesse tipo de representação as ligações entre os átomos não são representadas.

Uma vez que carbono é tetravalente, i.e., realiza quatro ligações, o hidrogénio é monovalente, faz apenas uma ligação covalente, e o oxigénio bivalente. Podemos representar a **fórmula estrutural plana** do etanol por:



Numa representação da estrutura por uma **fórmula estrutural plana**, podemos mostrar quais são os elementos químicos que compõem a molécula e o número exato deles, e também quais são as ligações que cada um realiza e a estrutura (arrumação ou disposição espacial) dos átomos dentro da molécula.

Pelo o facto do carbono poder formar ligações simples, duplas e triplas com outros átomos de carbono e/ou com outros tipos de átomos, torna-se muito útil o uso das representações que contemplam a informação acerca da ligação. De forma a ilustrar um alceno insaturado, veja as diferentes representações do 1-propeno:

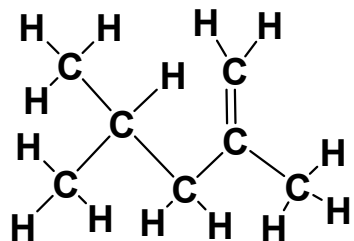


Na representação por uma fórmula condensada há uma simplificação da ligação do H. Fórmulas que elucidem a estrutura da cadeia, designam-se fórmulas esqueléticas.

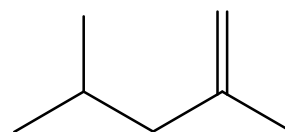


Numa representação por uma **fórmula de traços** as ligações entre os carbonos são representadas por traços. Numa ligação simples é um traço, uma ligação dupla são dois traços e uma ligação tripla são três traços. Os pontos de inflexão, bem como as pontas correspondem a átomos de carbono.

Neste tipo de representação a quantidade de hidrogénios fica subentendida, i.e., sabendo que o carbono faz quatro ligações. A quantidade de ligações em falta será o número de átomos de hidrogénio a que cada átomo de carbono está ligado. Como exemplo veja as representações da estrutura do 2,4-dimetilpent-1-eno.



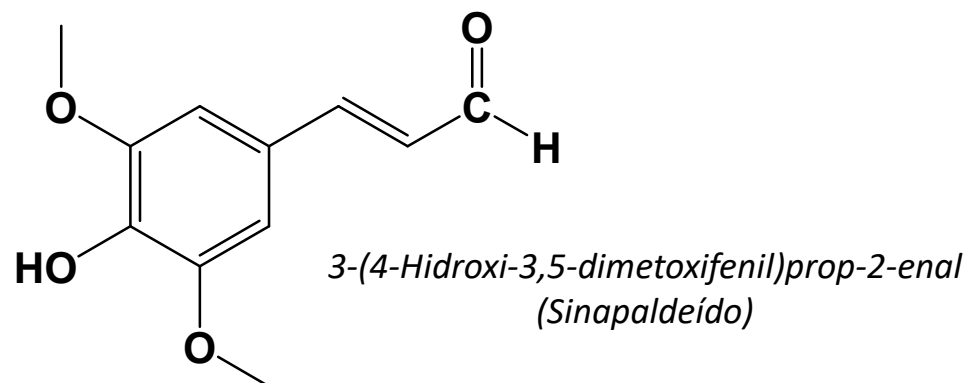
*fórmula estrutural plana
 (fórmula de Couper)*



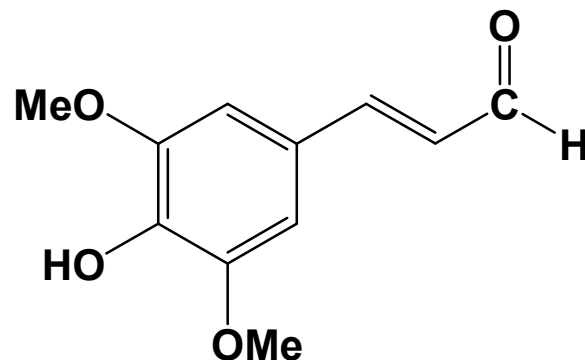
fórmula de traços

É evidente que a omissão dos átomos de hidrogénio além de simplificar, torna mais perceptível a representação estrutural do composto, neste caso o 2,4-dimetilpent-1-eno. Esta simplificação torna-se ainda mais evidente para cadeias moleculares longas.

Numa representação por **fórmula de traços**, pode-se, quando necessário, chamar a atenção para algum detalhe, destacando-se o átomo de carbono ou de hidrogénio, tal como ilustra o seguinte exemplo:

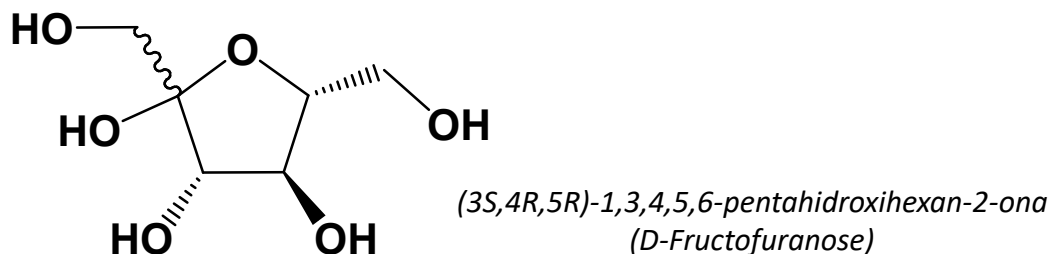


Quando conveniente pode-se usar siglas para representar ramificações.

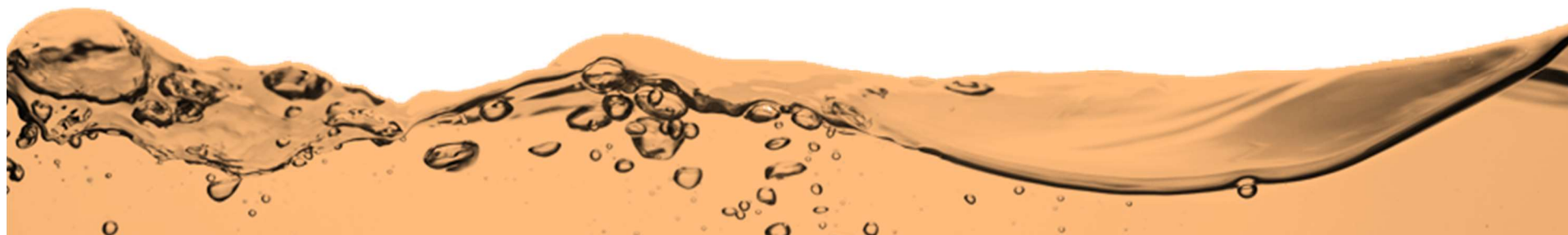


A estereoquímica pode ser ilustrada em fórmulas esqueléticas.

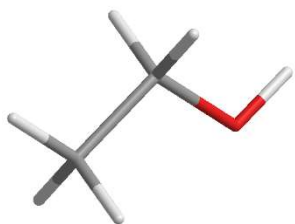
Quiralidade nas fórmulas esqueléticas é indicado usando a **projeção Natta**. Numa projeção Natta as ligações em cunha ou em cunha tracejadas representam ligações acima ou para trás do plano.



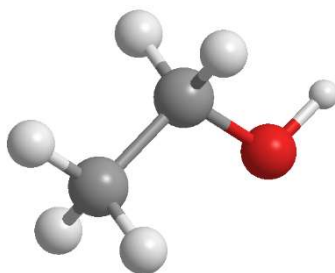
Ligações onduladas, representam ligações indiferenciadas, tanto acima como para trás do plano.



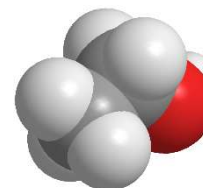
Com o recurso a ferramentas digitais gráficas é possível representar a mesma molécula do etanol ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$) anteriormente descrita, de forma a dar ênfase a diferentes aspetos. As representações espaciais das moléculas mais comuns são designadas por: **sticks**, **ball & sticks** e **space filling**.



sticks



ball & sticks

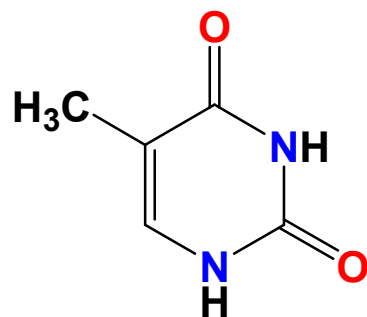


space filling

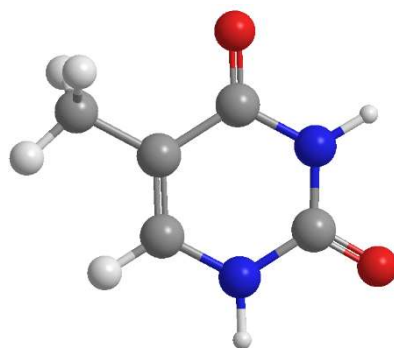
No uso deste tipo de representações é evidente a necessidade de descrever o código de cores usadas para cada átomo. No exemplo ilustrado usou-se o código de cores: carbono (cinzento), hidrogénio (branco) e oxigénio (vermelho).



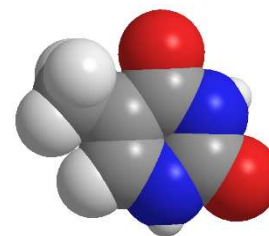
Os **códigos de cores** são também aplicados nas representações de **fórmulas de linhas**, evidenciando os diferentes átomos presentes na estrutura. No exemplo seguinte a estrutura da Timina é representada por três formas diferentes.



fórmula de traços



ball & sticks



space filling

*5-Metilpirimidina-2,4(1H,3H)-dione
Timina*

Código de cores nas representações por *ball & sticks* e *space filling*:
carbono (cinzento), hidrogénio (branco), oxigénio (vermelho) e azoto (azul).

