

EXERCÍCIO 1 – Interações não covalentes e ligações covalentes

- Utilize as informações apresentadas nas Tabelas 1A e 1B e desenhe as ligações ou interações conforme dados apresentados (Tabela 2) e a Figura 1. Observe que não estão representados os átomos de hidrogênio.

Tabela1A. Raios covalente e de van der Waals

átomo	raio covalente (Å)	raio de van der Waals (Å)
C	0.68	1.70
H	0.23	1.09
O	0.68	1.53
S	1.02	1.80
N	0.68	1.55

Tabela1B. Alguns comprimentos de ligação

átomos	tipo de ligação	comprimento(Å)
C–C	simples	1.54
C=C	dupla	1.34
C≡C	tripla	1.21
C \cdots C	aromática (parcialmente dupla)	1.40
C–N	simples	1.45
C=N	dupla	1.30
C \cdots N*	parcialmente dupla	1.34

*o símbolo \cdots indica uma ligação dupla delocalizada ou aromática.

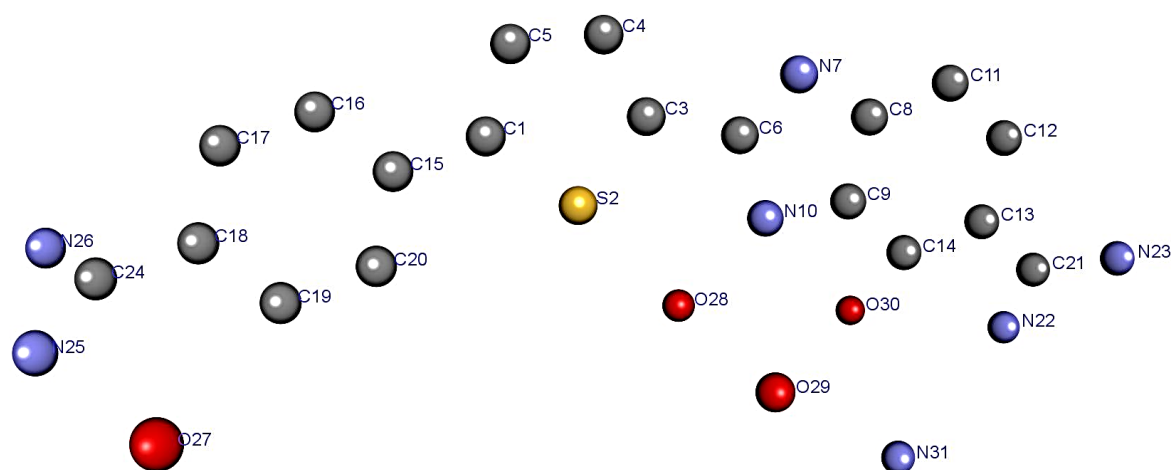


Figura 1. Átomos para desenhar ligações e interações.

Tabela 2. Distância entre átomos para a molécula da Figura 1

interação	átomos	distância entre átomos (Å)
1	C1 - S2	1,71
2	C1 - C5	1,39
3	C1 - C15	1,43
4	S2 - C3	1,70
5	C3 - C6	1,52
6	C3 - C4	1,37
7	C4 - C5	1,39
8	C6 - N7	1,29
9	C6 - N10	1,44
10	N7 - C8	1,39
11	C8 - C9	1,39
12	C8 - C11	1,40
13	C9 - C14	1,40
14	C9 - N10	1,40
15	C11 - C12	1,39
16	C12 - C13	1,43
17	C13 - C21	1,41
18	C13 - C14	1,43
19	C15 - C20	1,40
20	C15 - C16	1,41
21	C16 - C17	1,39
22	C17 - C18	1,42
23	C18 - C24	1,41
24	C18 - C19	1,41
25	C19 - C20	1,39
26	C21 - N23	1,34
27	C21 - N22	1,34
28	C24 - N26	1,33
29	C24 - N25	1,34
30	N10 - O29	2,92
31	N10 - O28	2,68
32	N22 - N31	3,16
33	N22 - O30	2,94
34	O27 - N25	3,17