

# Classes de Compostos Orgânicos

Nomenclatura, Propriedades Químicas e  
Físicas

# Conteúdo

- Nomenclatura de Compostos Orgânicos
- Estruturas de Hidrocarbonetos Saturados e Insaturados, Halogenetos de Alquila, Álcoois, Éteres e Aminas
- Propriedades Físicas e Químicas
- Estudo Conformacional de Alcanos
- Cicloalcanos

# Nomenclatura de Compostos Orgânicos

- Baseada na nomenclatura de hidrocarbonetos saturados e insaturados:
- Alcanos
- Alcenos
- Alcinos
  - Compostos que apresentam somente C e H
  - Carbonos com hibridização  $sp^3$ ,  $sp^2$  e  $sp$ .

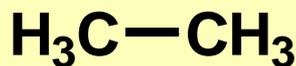
# Alcanos

Compostos contendo somente C e H e ligações simples C-C

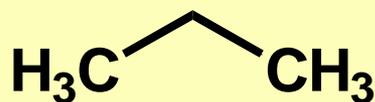
Fórmula geral:  $C_nH_{2n+2}$  aonde  $n = 1, 2, 3, \dots$



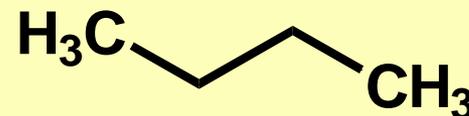
metano



etano



propano

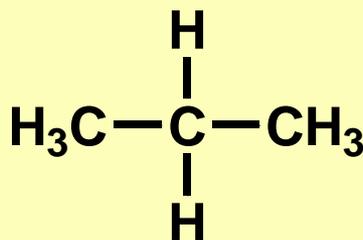


n-butano

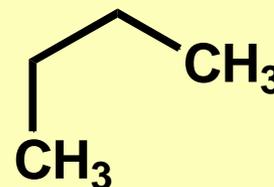
## Detalhes importantes



errado!!



correto

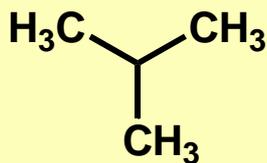


correto

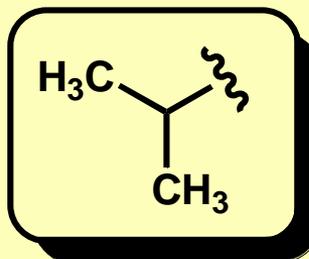
# Alcanos



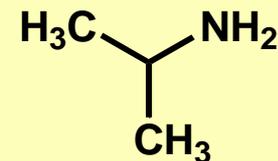
n-butano



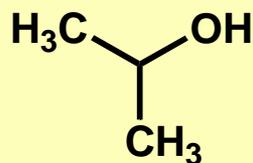
metil-propano  
ou  
isobutano



grupo radical  
"isopropila"

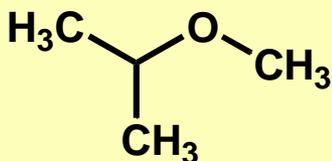


isopropilamina

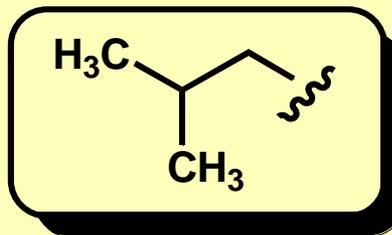


isopropilálcool  
ou  
álcool isopropílico  
ou

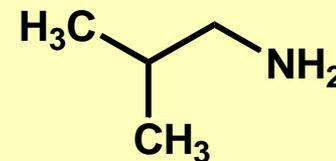
**isopropanol**



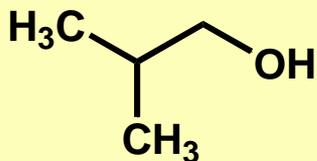
isopropilmetil éter



grupo radical  
"isobutila"

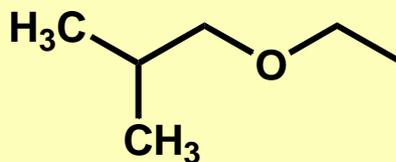


isobutilamina

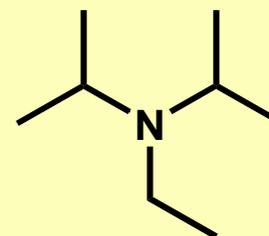


álcool isobutílico  
ou

**isobutanol**



etilisobutil éter

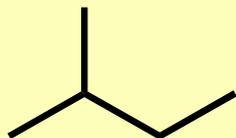


disopropiletil amina  
(Base de Hünig)

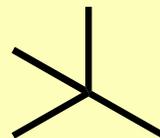
# Alcanos



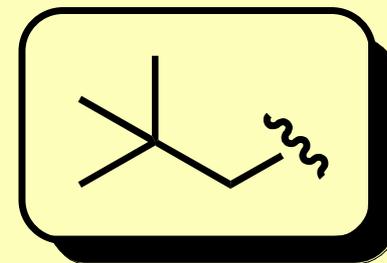
n-pentano



2-metilbutano  
ou  
isopentano



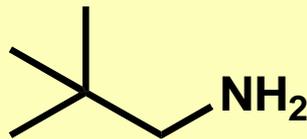
2,2-dimetilpropano  
ou  
neopentano



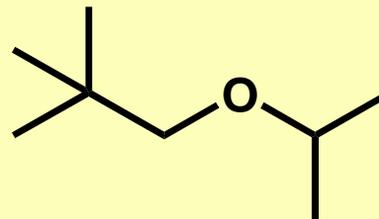
grupo radical  
"neopentila"



álcool neopentílico  
ou  
neopentanol

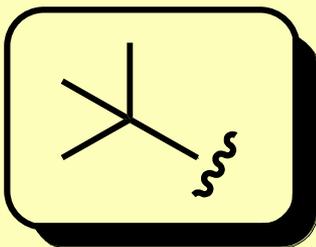


neopentilamina

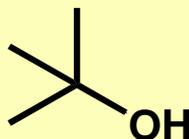


isopropilneopentil éter

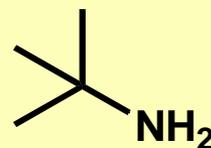
## NÃO CONFUNDIR COM



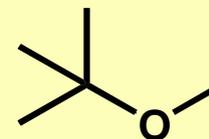
grupo radical  
"tert-butil"



tert-butanol



tert-butil amina

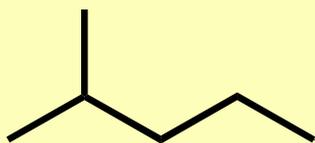


metil-tert-butil éter

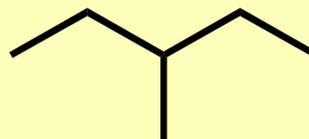
# Alcanos



n-hexano



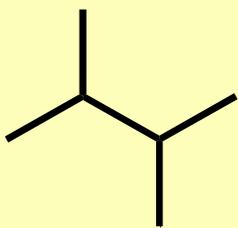
2-metilpentano  
ou  
isohexano



3-metilpentano



2,2-dimetilbutano



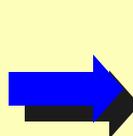
2,3-dimetilbutano

Todos apresentam fórmula  $C_6H_{14}$

Substâncias isoméricas ou compostos isômeros.

**Iso:** igual (Grego)

**Mero:** unidades (Grego)



Unidades iguais, ou seja,  
mesma composição

# Isomeria de Alcanos

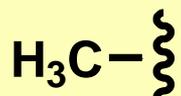
**Isomeria estrutural** → mesma fórmula molecular, mas diferente fórmula estrutural

Número de átomos de carbonos	Fórmula Molecular	Número de Isômeros
6	$C_6H_{14}$	5
7	$C_7H_{16}$	9
12	$C_{12}H_{26}$	75
15	$C_{15}H_{32}$	4347

# Nomenclatura Sistemática de Compostos Orgânicos

- Segue as regras estabelecidas pela União Internacional de Química Pura e Aplicada [International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC)].
- A nomenclatura sistemática estabelece que **cada composto orgânico com uma determinada estrutura apresenta apenas um nome sistemático.**
- Nomes como “iso-” e “neo-” são **nomes comuns**, mas não são nomes sistemáticos.
- Um composto pode ter mais de um nome, mas **um nome deve designar apenas 1 composto.**

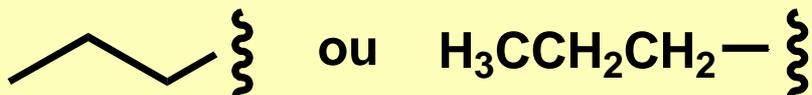
# Nomenclatura dos grupos radicais



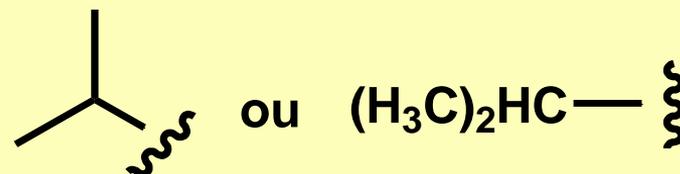
metila (Me)



etila (Et)



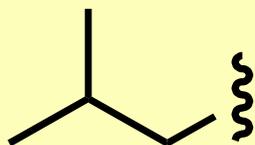
Propila (Pr)



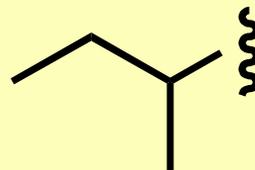
isopropila (i-Pr)



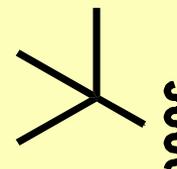
Butila (Bu)



isobutila (i-Bu)

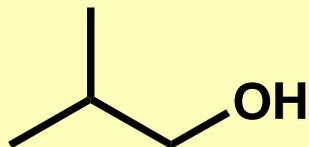


sec-Butila

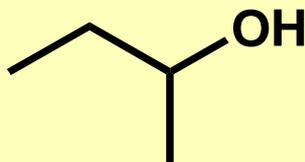


tert-Butila (t-Bu)

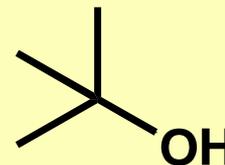
# Nomenclatura dos grupos radicais



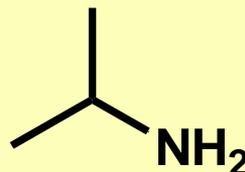
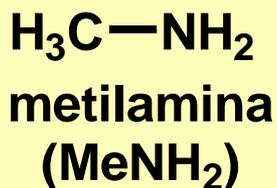
isobutanol ou  
álcool isobutílico  
(i-BuOH)



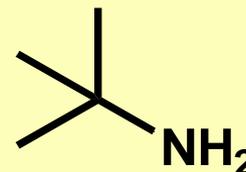
sec-butanol ou  
álcool sec-butílico  
(s-BuOH)



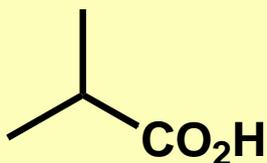
tert-butanol ou  
álcool tert-butílico  
(t-BuOH)



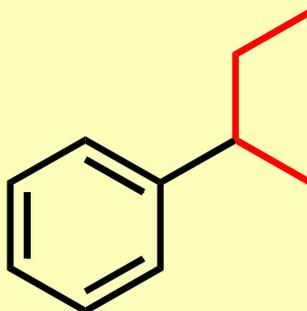
isopropilamina  
(i-PrNH<sub>2</sub>)



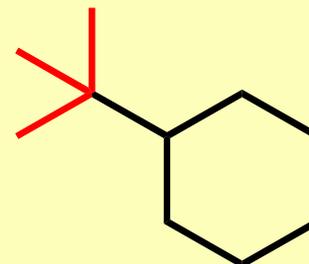
tert-butilamina  
(t-BuNH<sub>2</sub>)



ácido  
isopropanóico  
(i-PrCO<sub>2</sub>H)



sec-butil benzeno



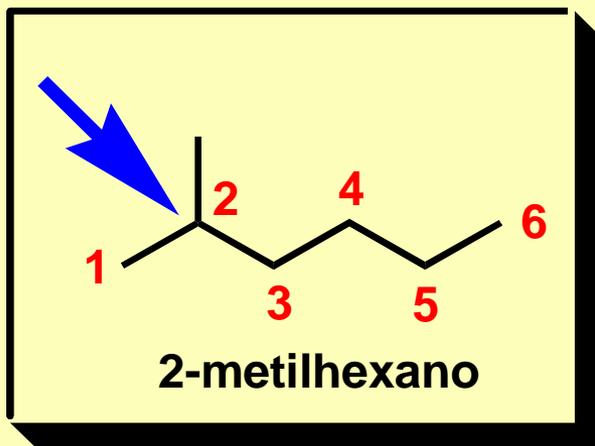
tert-butil ciclohexano

# Nomenclatura de compostos orgânicos

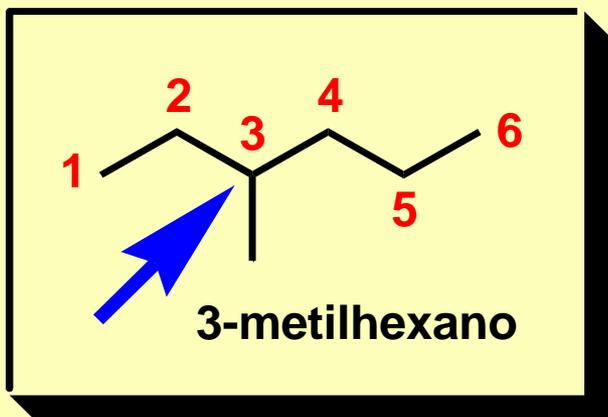
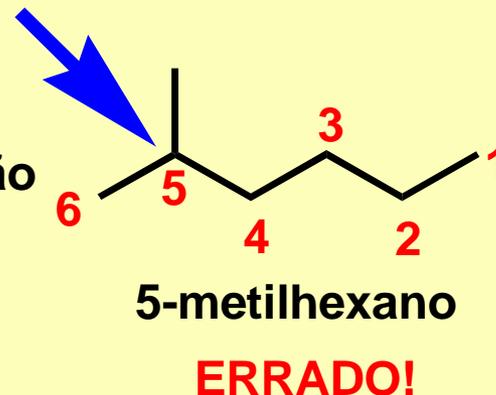
- Alcanos → combina-se o nome dos radicais com o nome do composto em função da **cadeia de carbonos principal, que é a mais longa**, e a numeração dos radicais deve se referir sempre à **menor posição possível**.



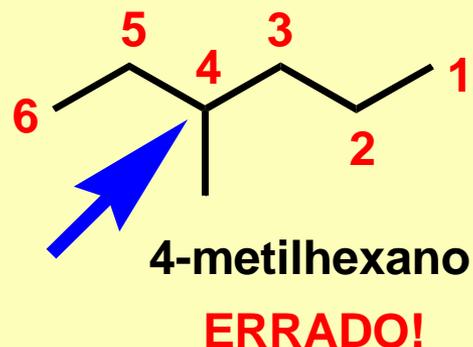
heptano



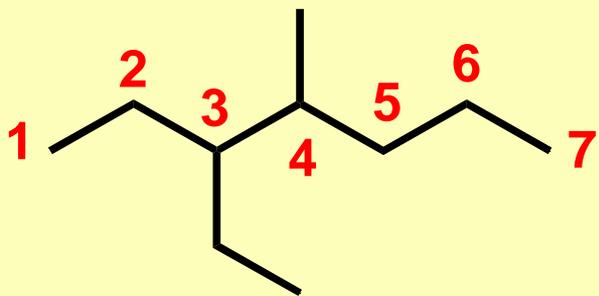
mas não



mas não



# Nomenclatura de compostos orgânicos



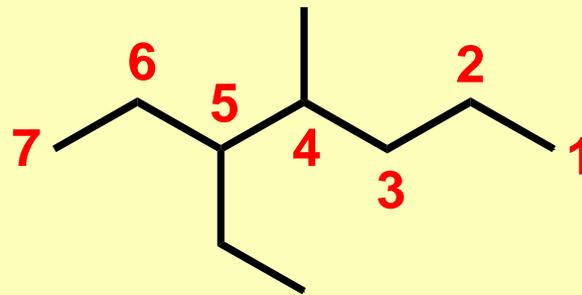
**3-etil-4-metilheptano**

mas não

**4-metil-3-etilheptano**

(ordem alfabética!!)

mas não

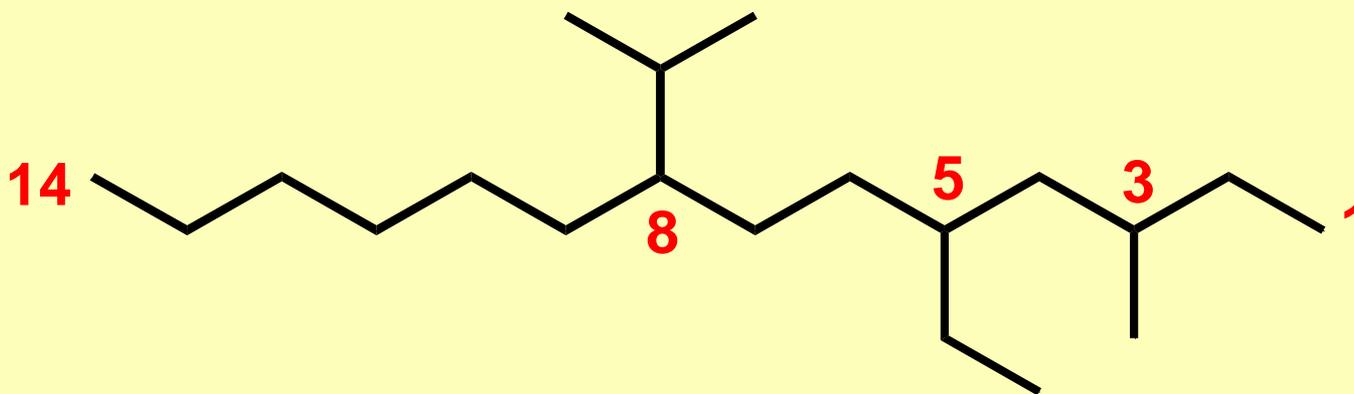


**5-etil-4-metilheptano**

ou

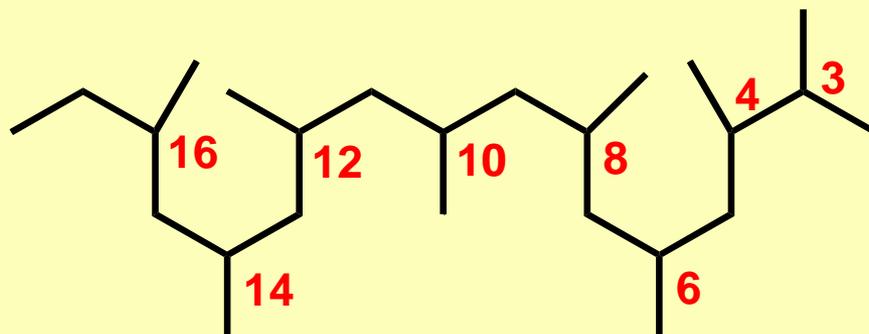
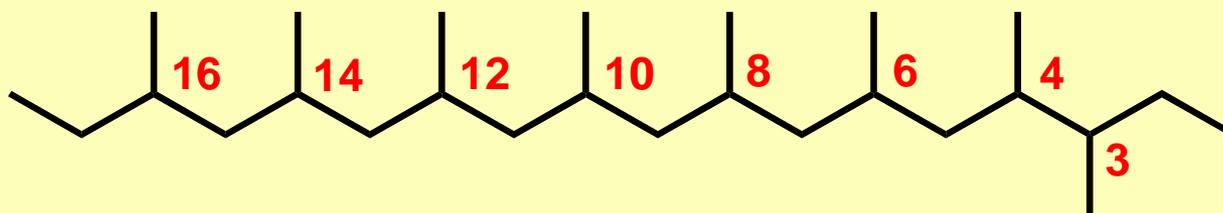
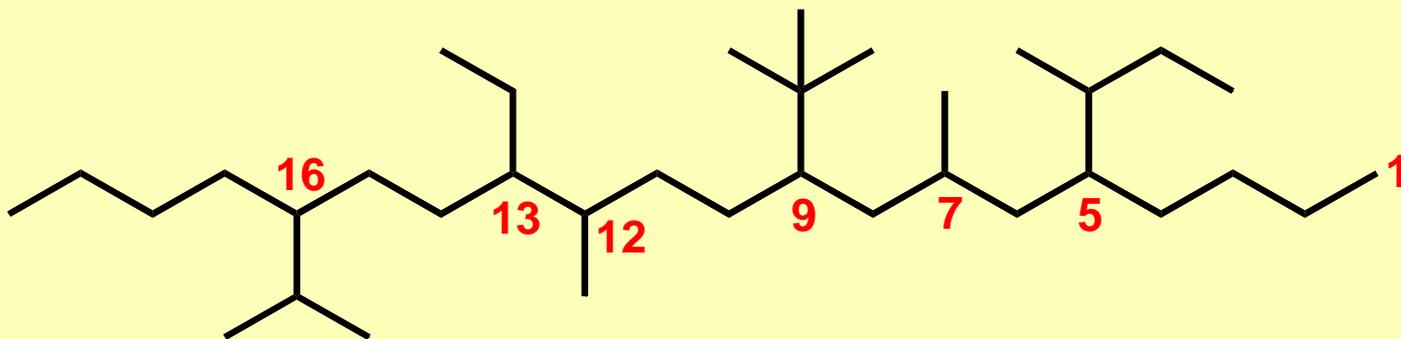
**4-metil-5-etilheptano**

(AMBAS ERRADAS!!)



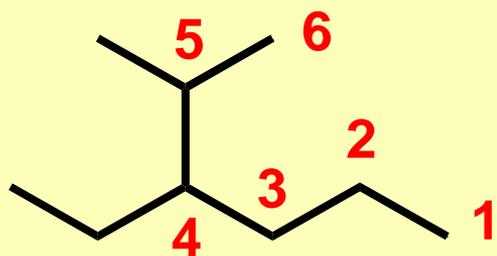
**5-etil-8-isopropil-3-metiltetradecano**

# Nomenclatura de compostos orgânicos



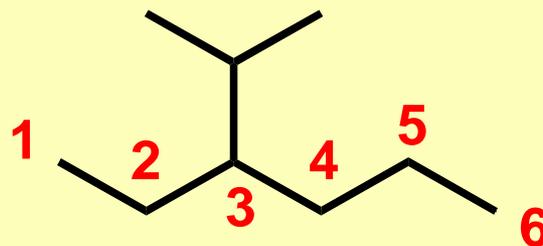
# Nomenclatura de compostos orgânicos

- Caso a cadeia principal mais longa possa ser mais de uma alternativa, dá-se preferência àquela com maior número de substituintes.

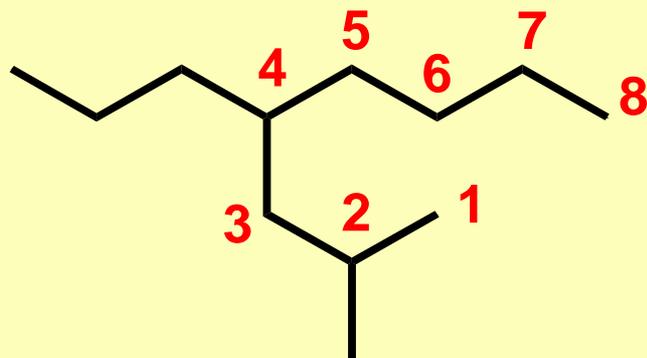


4-etil-5-metilhexano

mas não

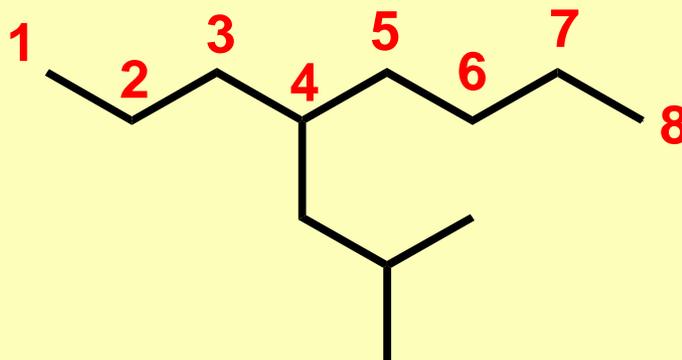


3-isopropilhexano



2-metil-4-propiloctano

mas não

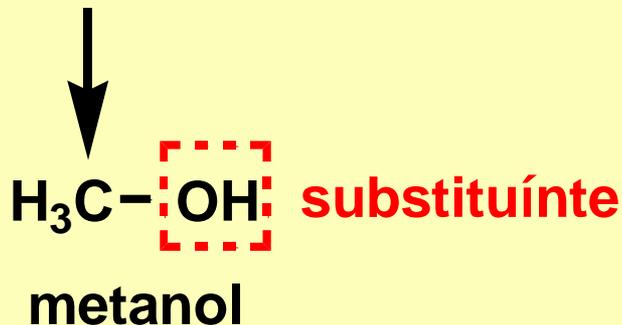


4-isobutiloctano

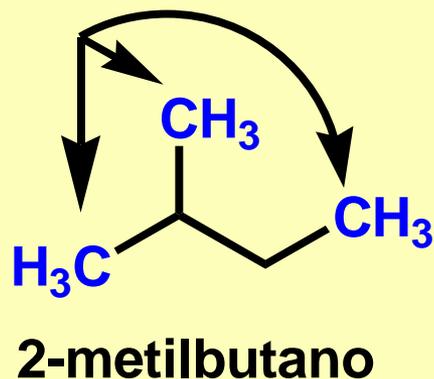
# Nomenclatura de compostos orgânicos

- Carbono primário → apresenta 1 carbono ligado.

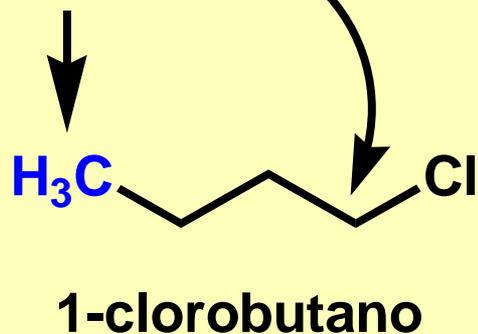
carbono 1°



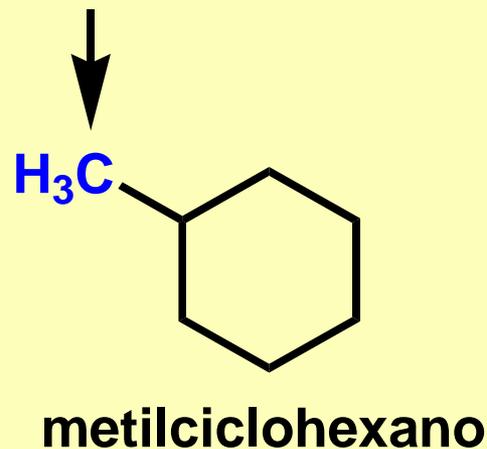
carbonos 1°s



carbonos 1°

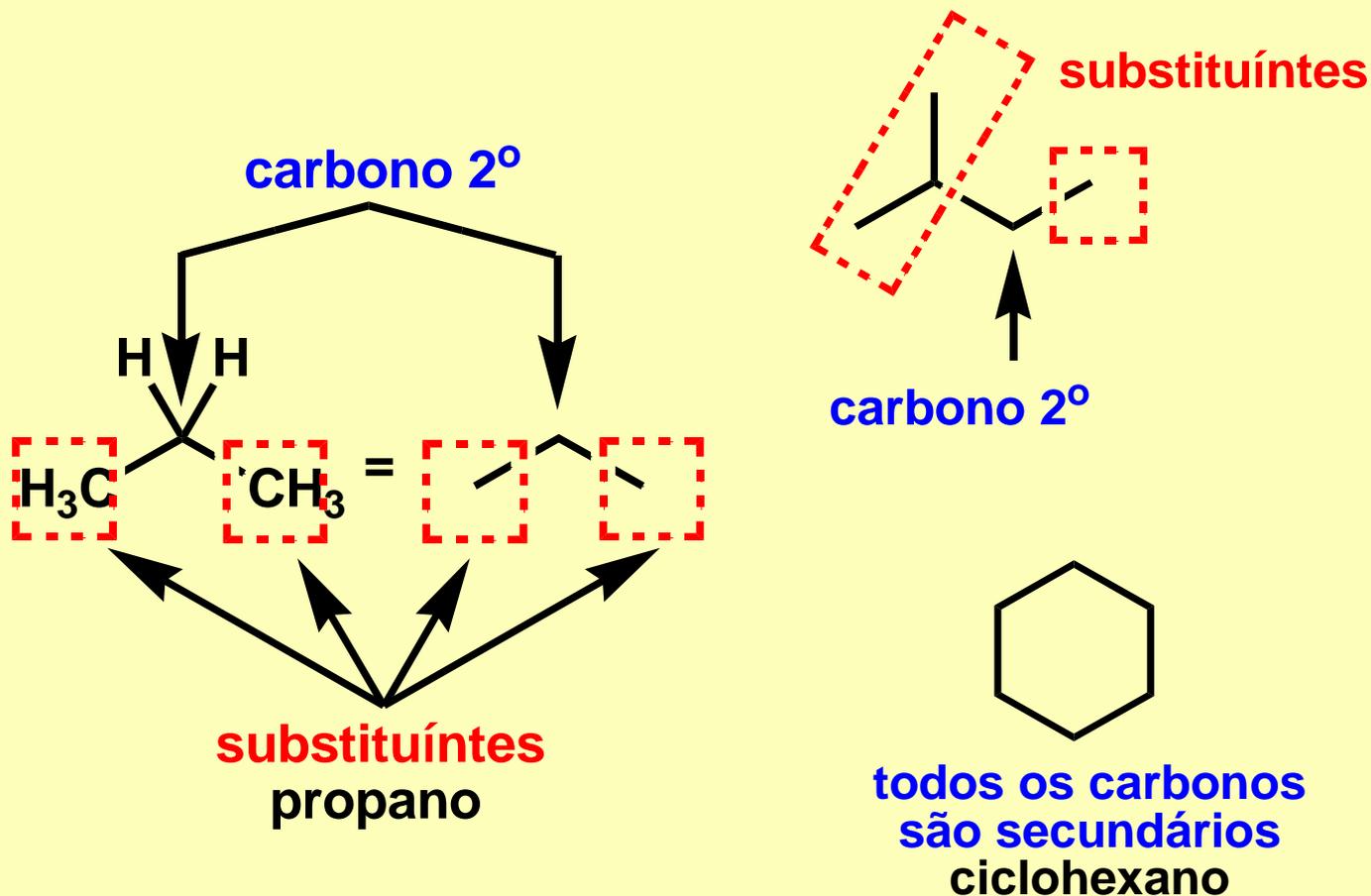


carbono 1°



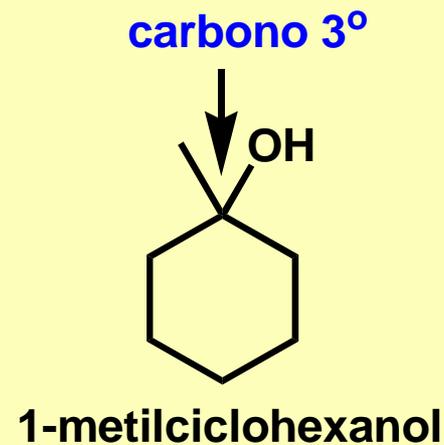
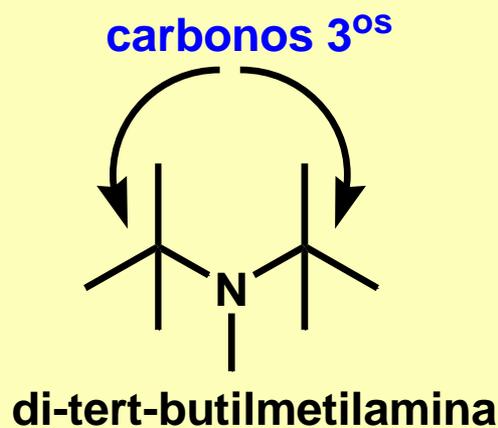
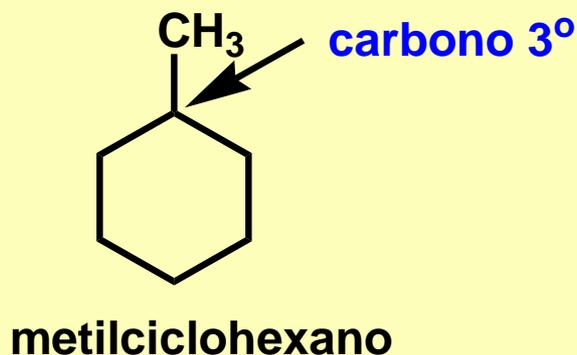
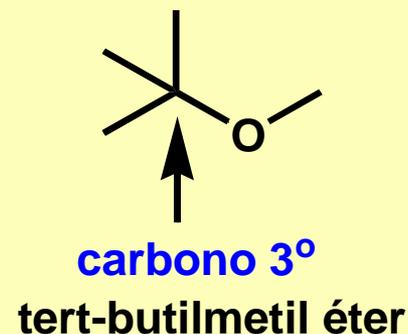
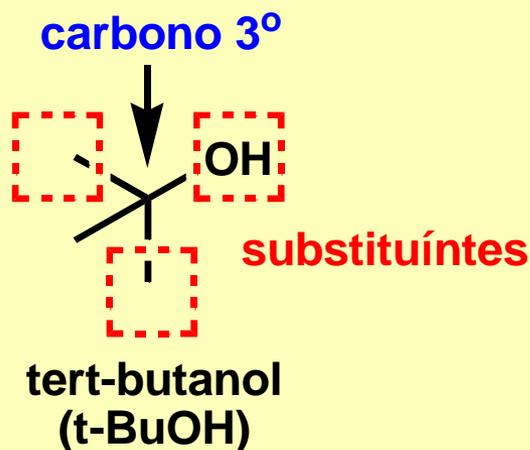
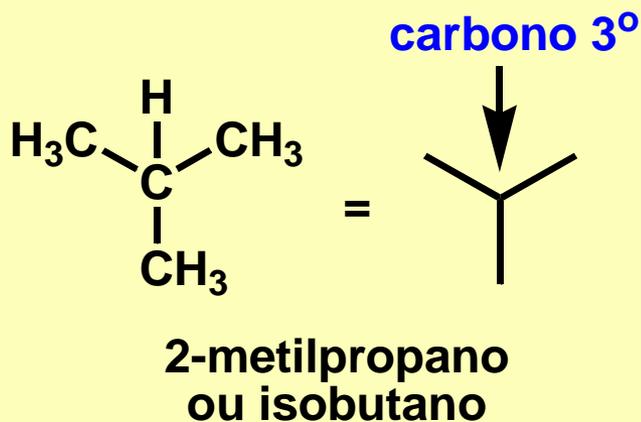
# Nomenclatura de compostos orgânicos

- Carbono secundário → possui 2 átomos de carbono ligados



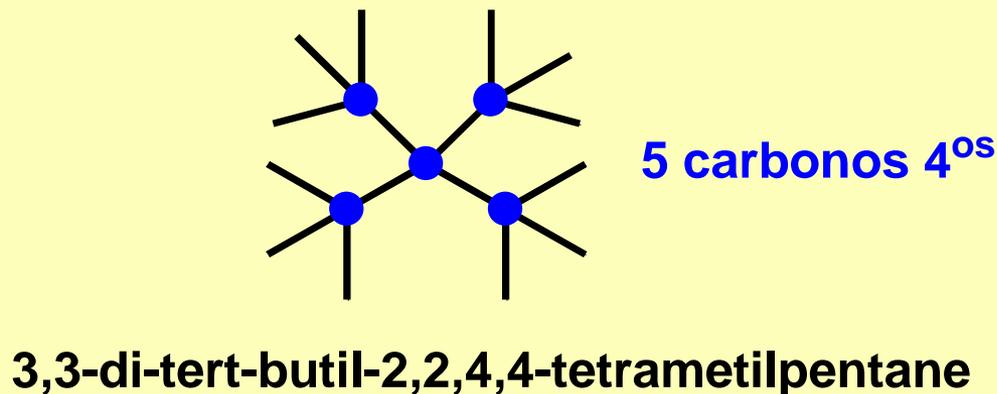
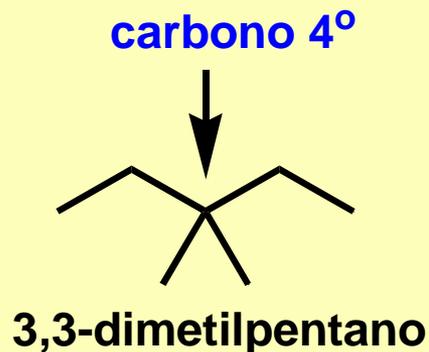
# Nomenclatura de compostos orgânicos

- Carbono terciário → possui 3 átomos de carbono ligados



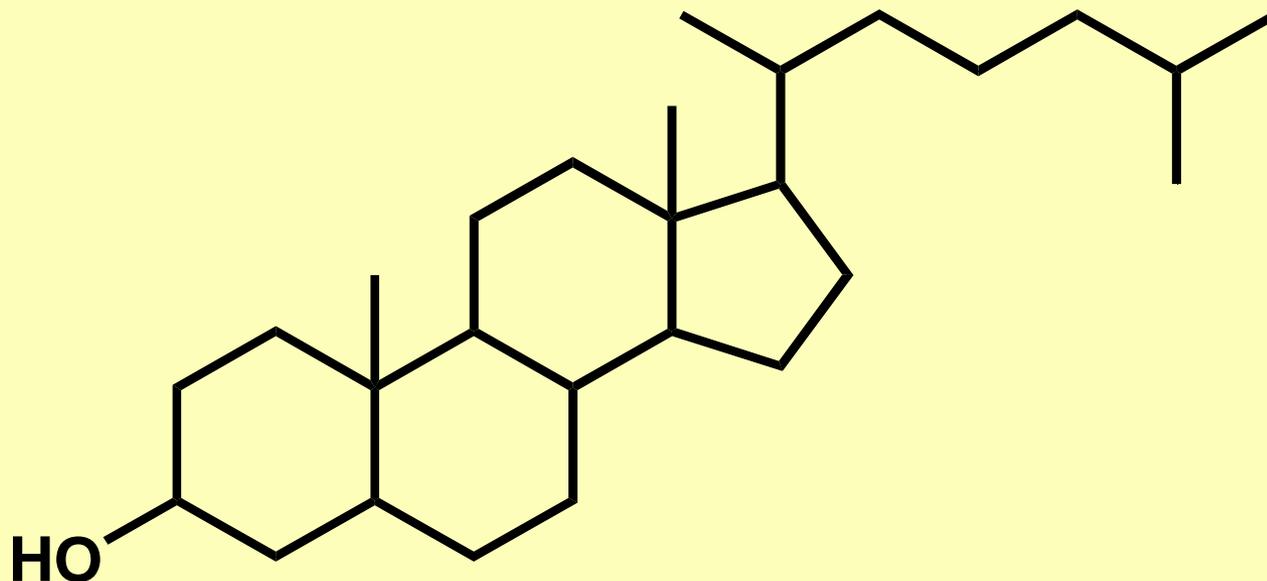
# Nomenclatura de compostos orgânicos

- Carbono quaternário → 4 carbonos



# Nomenclatura de compostos orgânicos

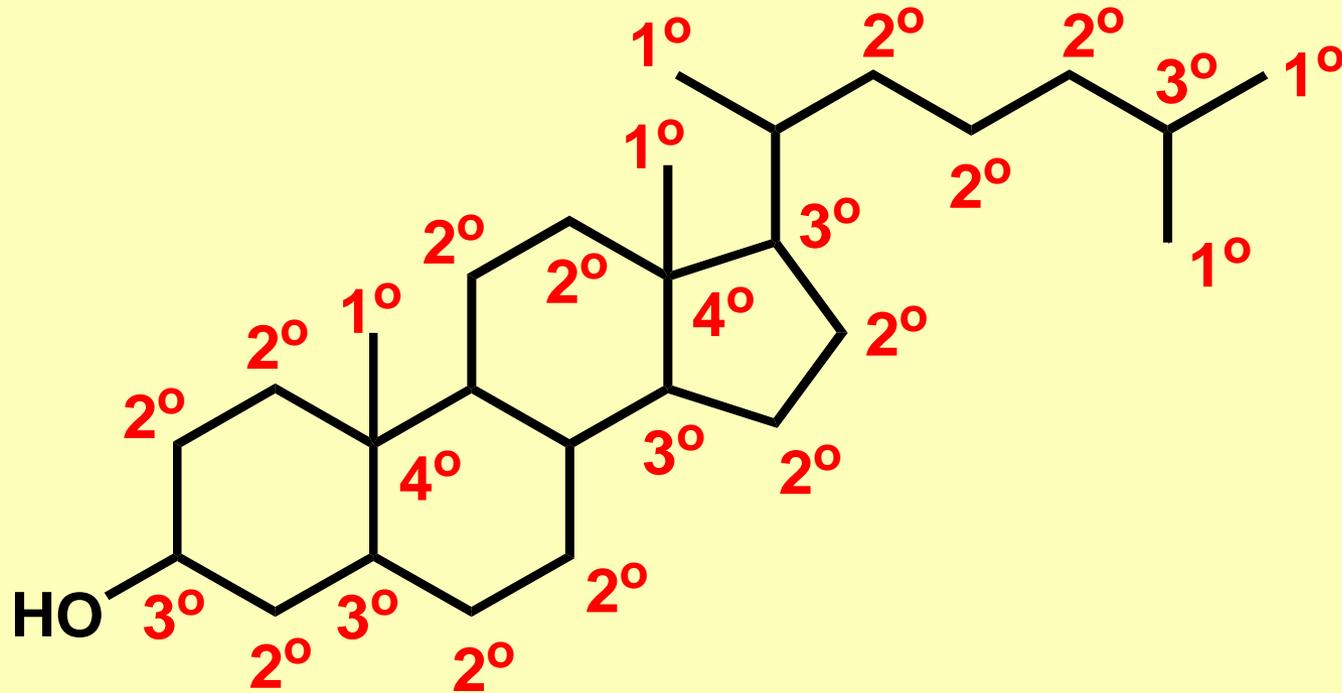
- Indicar tipos de carbonos no colestanol



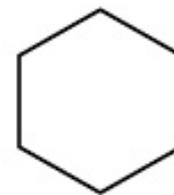
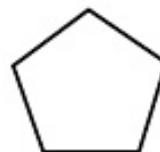
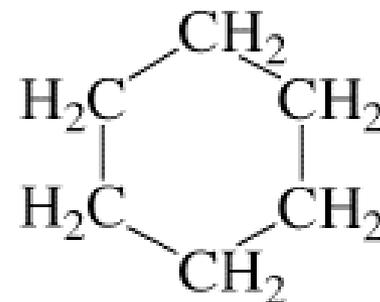
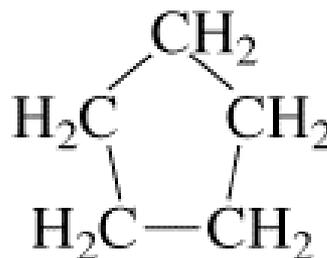
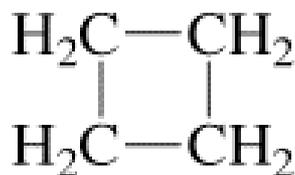
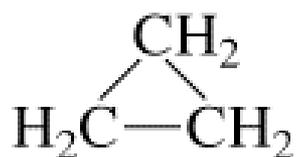
**hexadecahidro-10,13-dimetil-17-(6-metilheptan-2-il)-1*H*-  
ciclopenta[*a*]fenantren-3-ol**

# Nomenclatura de compostos orgânicos

- Indicar tipos de carbonos no colestanol



# Nomenclatura de Cicloalcanos



**ciclopropano**

**ciclobutano**

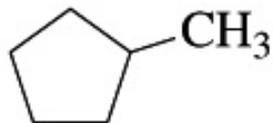
**ciclopentano**

**ciclohexano**

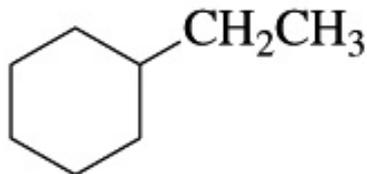
**Etc...**

# Nomenclatura de Cicloalcanos

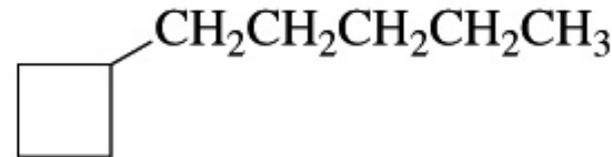
1. O anel (ciclo) constitui a cadeia principal, a menos que este esteja ligado a uma cadeia maior.
2. Se só existe 1 substituínte no anel, não há necessidade de numerá-lo.



metilciclopentano

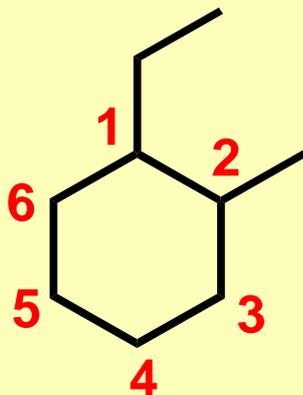


etilciclohexano



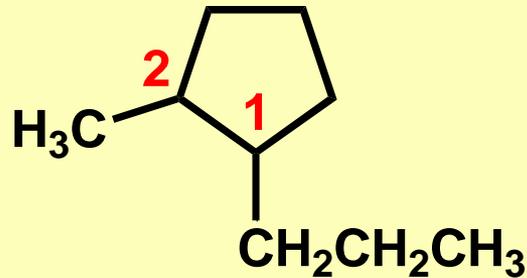
1-ciclobutilpentano

1. 3. Se o anel tem 2 substituíntes, devem ser nomeados em ordem alfabética e indicar a posição 1 ao primeiro.

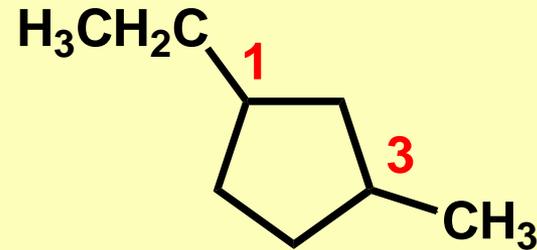


1-etil-2-metilciclohexano  
mas não  
1-metil-2etilciclohexano

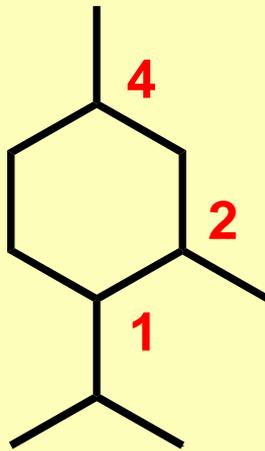
# Nomenclatura de Cicloalcanos



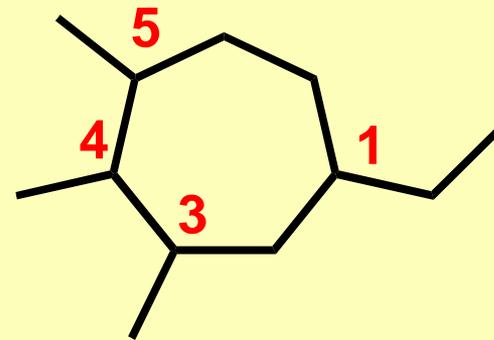
**1-metil-2-propilciclopentano**



**1-etil-3-metilciclopentano**



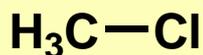
**1-isopropil-2,4-dimetilciclohexano**



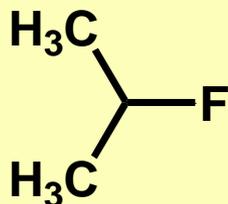
**1-etil-3,4,5-trimetilcicloheptano**

# Nomenclatura de halogenetos de alquila

- Na nomenclatura comum (não IUPAC), indica-se o nome do halogênio com radical “eto” e o nome do substituínte alquila a seguir.



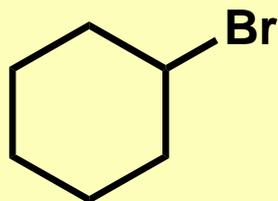
cloreto de metila



fluoreto de isopropila



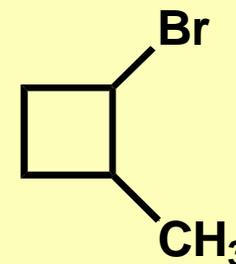
iodeto de sec-butila



brometo de ciclohexila



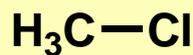
cloreto de ciclopropila



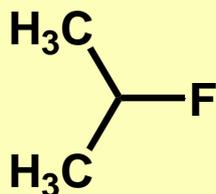
brometo de 2-metilciclobutila

# Nomenclatura de halogenetos de alquila

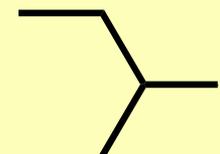
- Todavía, na nomenclatura IUPAC os halogênios são considerados substituintes.



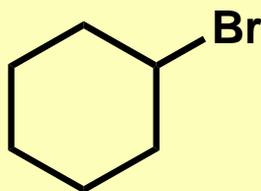
clorometano



2-fluoropropano



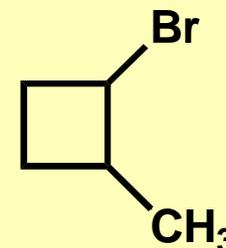
2-iodobutano



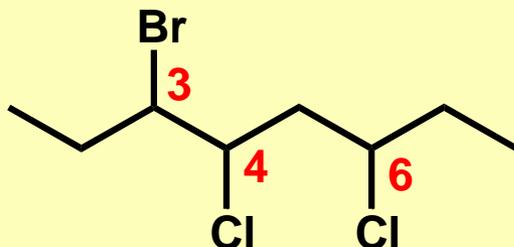
bromociclohexano



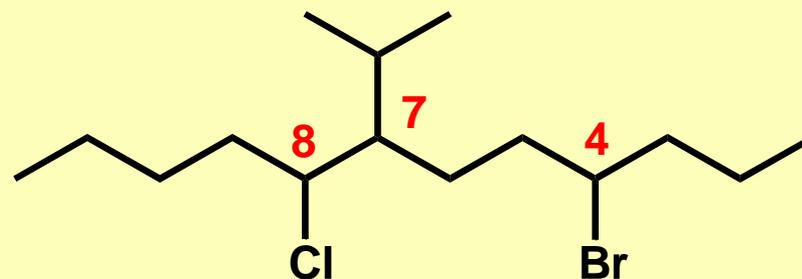
clorociclohexano



1-bromo-2-metilciclobutano



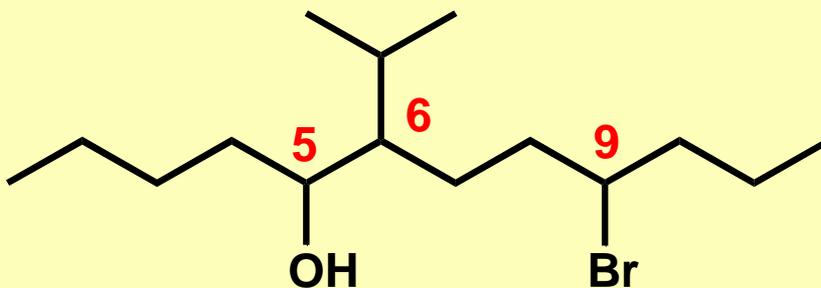
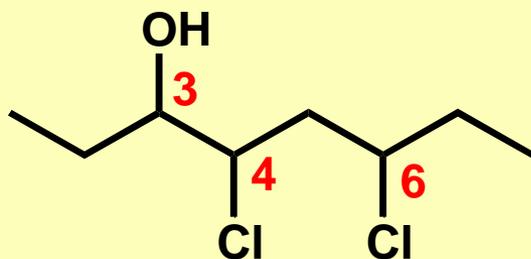
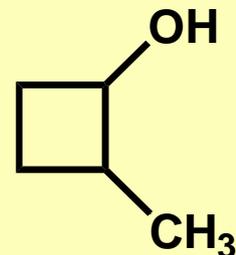
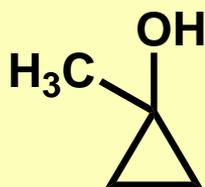
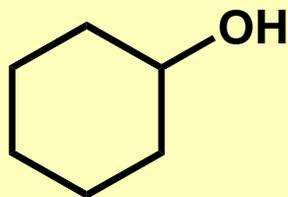
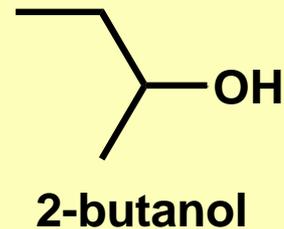
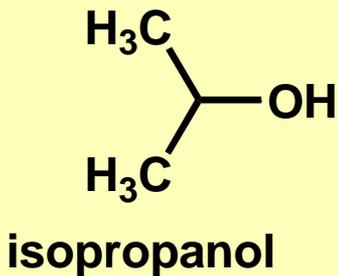
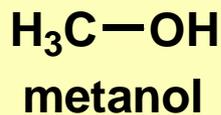
3-bromo-4,6-diclorooctano



4-bromo-8-cloro-7-isopropildodecano

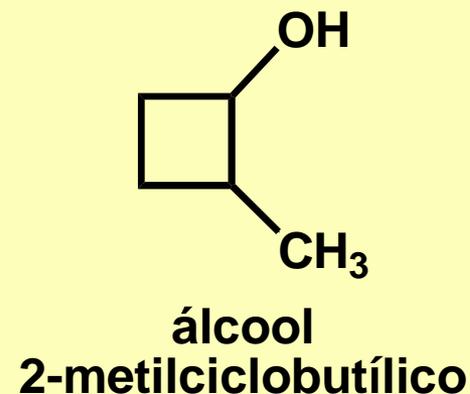
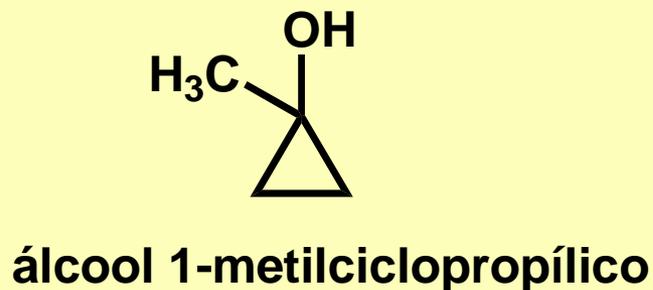
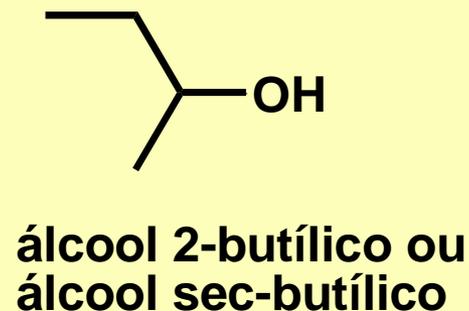
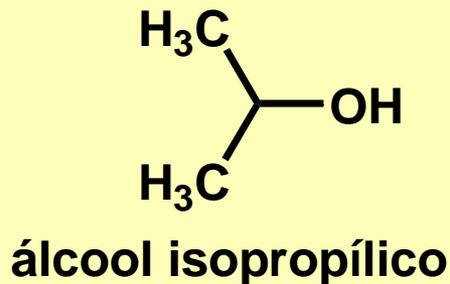
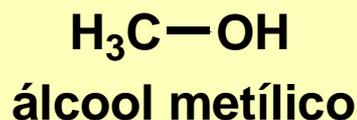
# Nomenclatura de álcoois

- Nomenclatura IUPAC → nome da cadeia, com sufixo “ol”.



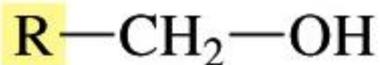
# Nomenclatura de álcoois

Nomenclatura comum → “álcool” + nome do radical da cadeia.

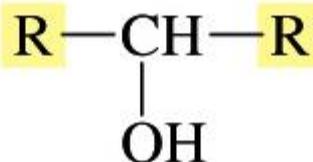


# Nomenclatura de Álcoois

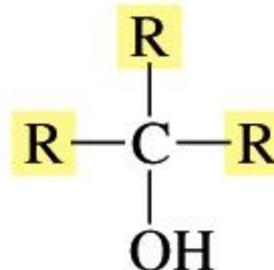
- Álcoois também são classificados como **primários**, **secundários** ou **terciários**



álcoois  
primários



álcoois  
secundários



álcoois  
terciários

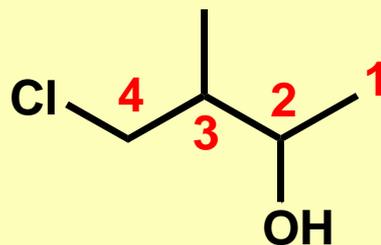
R = qualquer radical, que pode ser cadeia alquila ou anel do tipo benzeno

# Nomenclatura IUPAC dos álcoois

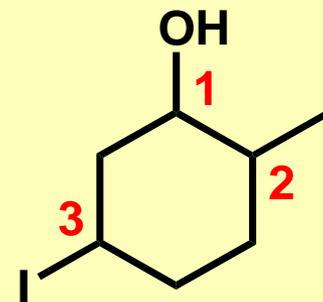
1. Localizar a cadeia mais longa que contém o grupo “OH”.
2. Numerar a cadeia de tal maneira que o grupo “OH” assuma a menor numeração possível.
3. Se houver outros substituíntes, o grupo OH deve sempre apresentar o menor número dentre as possibilidades.
4. Se o grupo “OH” tem o mesmo número dentre 2 ou mais possibilidades, os outros substituíntes devem assumir os menores números possíveis.
5. Citar os substituíntes em ordem alfabética.



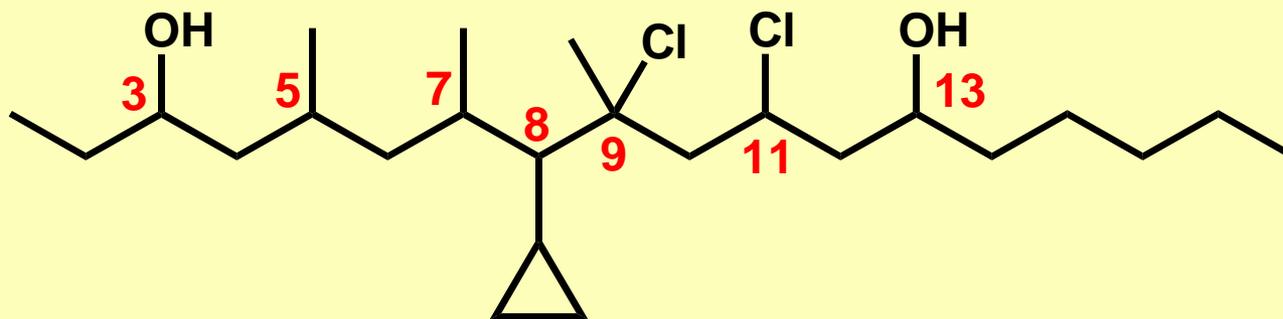
5-bromo-1-pentanol  
ou  
5-bromo-pentan-1-ol



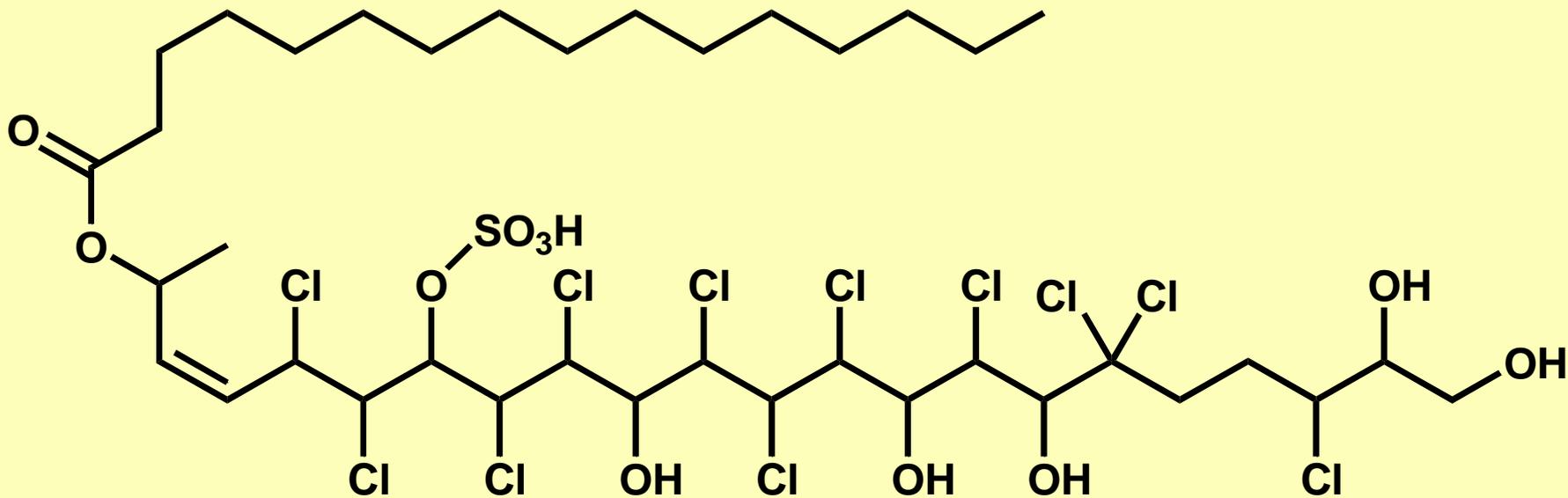
4-cloro-3-metil-2-butanol  
ou  
4-cloro-3-metilbutan-2-ol



5-iodo-2-metilciclohexanol  
mas **NÃO**  
**3-iodo-6-metilciclohexanol**



9,11-dicloro-8-ciclopropil-5,7,9-trimetil-3,13-octadecanodiol  
ou  
9,11-dicloro-8-ciclopropil-5,7,9-trimetiloctadecano-3,13-diol

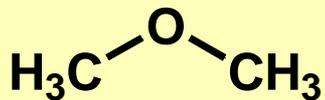


palmitoato de (Z)-5,6,8,9,11,12,13,15,17,17,20-undecacloro-10,14,16,21,22-pentahidroxy-7-sulfatodocos-3-en-2-ila

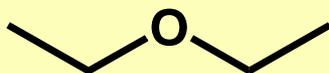
**Substância extremamente tóxica  
produzida por dinoflagelados e  
acumulado em mariscos e ostras**

# Nomenclatura de éteres

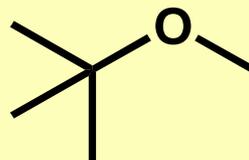
- **Éteres** – Substâncias com 1 oxigênio substituído por duas cadeias alquila ou por anéis do tipo benzeno.
- Nomenclatura → indicar os radicais, seguido do nome “éter”.



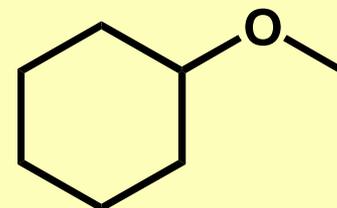
dimetil éter



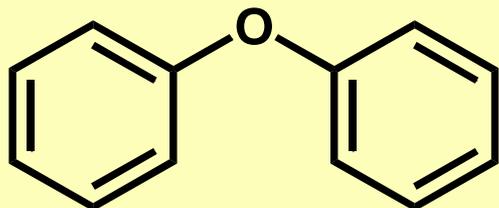
dietil éter  
ou éter etílico



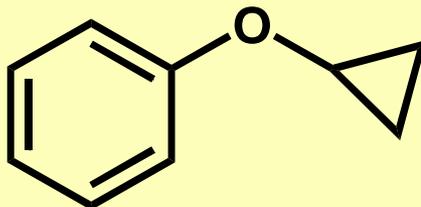
tert-butilmetil éter



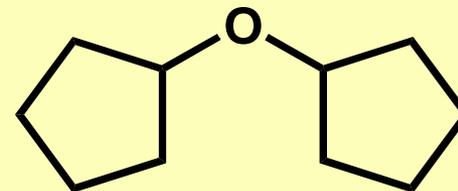
ciclohexilmetil éter



difenil éter



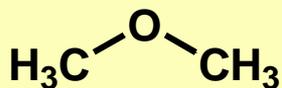
fenilciclopropil éter



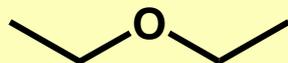
diciclopentil éter

# Nomenclatura de éteres

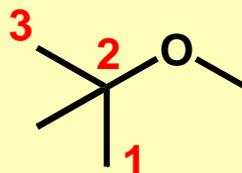
- Nomenclatura IUPAC → o grupo éter é visto como um substituínte “alcóxi”.



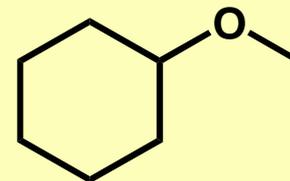
metóximetano



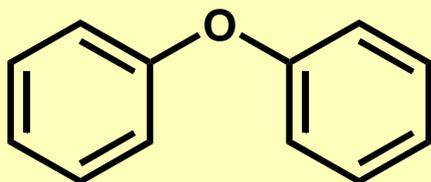
etóxietano



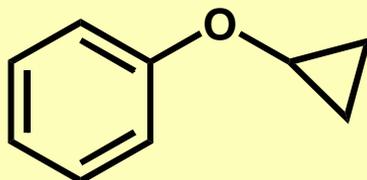
2-metoxi-2-metilpropano



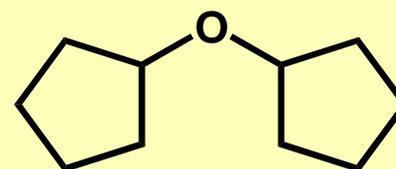
metóxiciclohexano



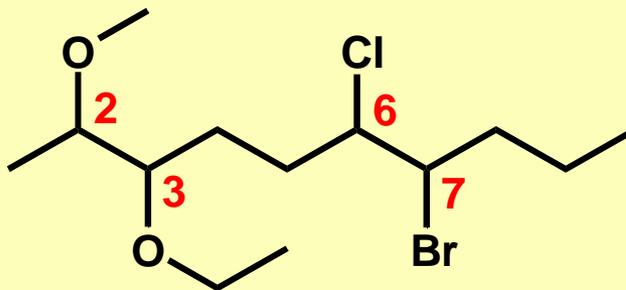
fenóxibenzeno



ciclopropóxibenzeno



(ciclopentilóxi)ciclopentano

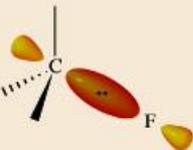
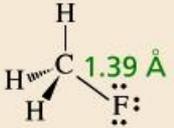
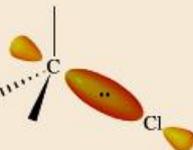
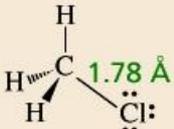
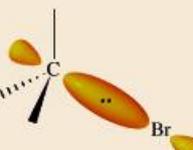
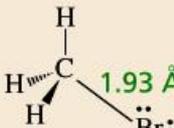
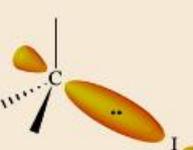
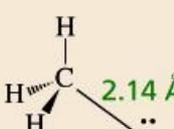


7-bromo-6-cloro-3-etóxi-2-metóxidecano

# Propriedades Químicas e Físicas de halogenetos de alquila, álcoois e éteres

- Grupos –OH, -O-R e –halogênio → grupos POLARES

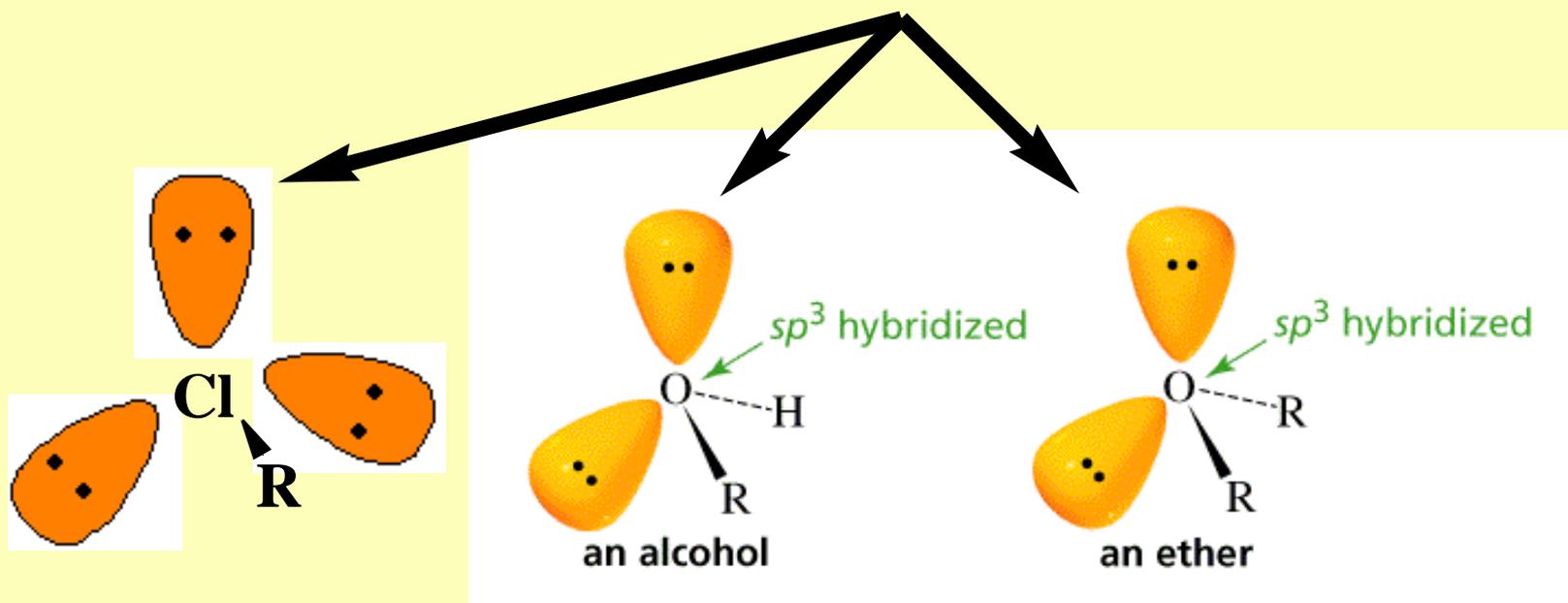
TABLE 2.4 Carbon–Halogen Bond Lengths and Bond Strengths

	Orbital interactions	Bond lengths	Bond strength kcal/mol	( $DH^\circ$ ) kJ/mol
$H_3C-F$			108	451
$H_3C-Cl$			84	350
$H_3C-Br$			70	294
$H_3C-I$			57	239

devido à  
eletronegatividade  
dos elementos

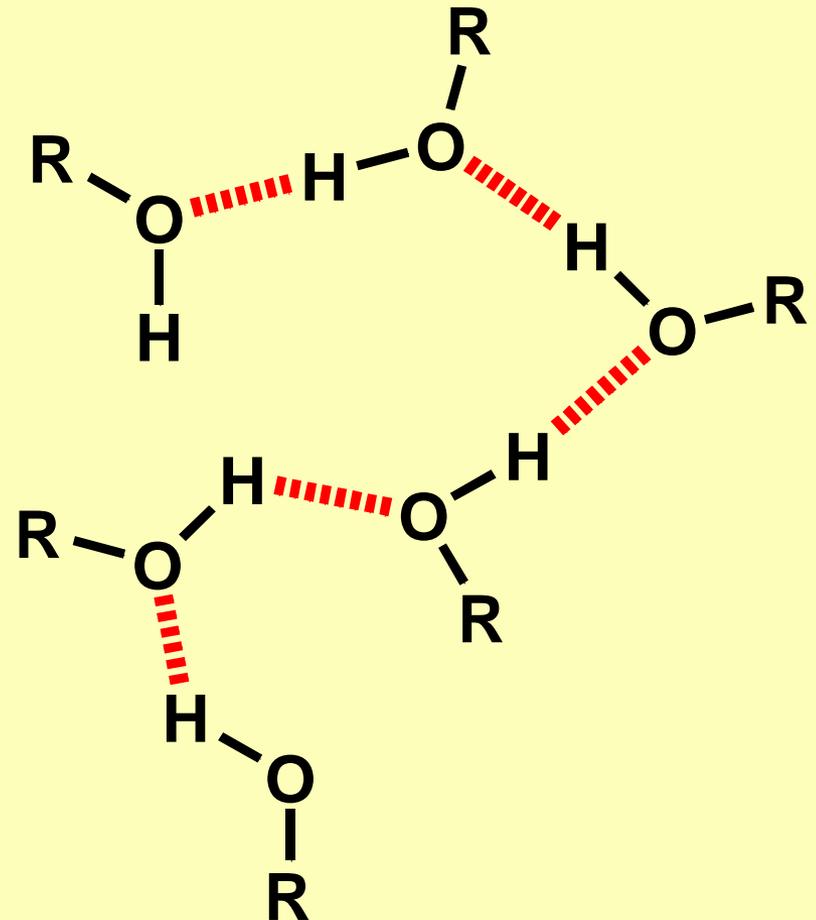
# Propriedades Químicas e Físicas de halogenetos de alquila, álcoois e éteres

Pares de elétrons livres → interações eletrostáticas



# Propriedades Químicas e Físicas de halogenetos de alquila, álcoois e éteres

**Grupos polares formados por átomos eletronegativos ligados a hidrogênios, tal como na água, álcoois, aminas e outros, irão interagir fortemente através de forças eletrostáticas, formando ligações fracas que aumentam muito o grau de interação intermolecular → LIGAÇÕES HIDROGÊNIO**



# Propriedades Químicas e Físicas de halogenetos de alquila, álcoois e éteres

As interações intermoleculares através de forças eletrostáticas envolvendo hidrogênios (**ligações hidrogênio**) irão influenciar diretamente três propriedades físicas de compostos deste tipo: 1-ponto de ebulição; 2-ponto de fusão e; 3-solubilidade

- O ponto de ebulição de compostos que podem formar ligações hidrogênio é sempre mais alto do que aqueles que não podem.
- O mesmo vale para o ponto de fusão.
- Solubilidade → “semelhante solvata semelhante”
- OUTRAS PROPRIEDADES DOS POLÍMEROS QUE INTERAGEM VIA LIGAÇÕES HIDROGÊNIO SÃO AFETADAS

# Propriedades Químicas e Físicas de halogenetos de alquila, álcoois e éteres

**Table 2.3 Physical properties of representative compounds**

COMPOUND	STRUCTURE	mp (°C)	bp (°C) (1 atm)
Methane	CH <sub>4</sub>	-182.6	-162
Ethane	CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	-183	-88.2
Ethene	CH <sub>2</sub> = CH <sub>2</sub>	-169	-102
Ethyne	HC ≡ CH	-82	-84 subl a
Chloromethane	CH <sub>3</sub> Cl	-97	-23.7
Chloroethane	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> Cl	-138.7	13.1
Ethyl alcohol	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OH	-115	78.5
Acetaldehyde	CH <sub>3</sub> CHO	-121	20
Acetic acid	CH <sub>3</sub> CO <sub>2</sub> H	16.6	118
Sodium acetate	CH <sub>3</sub> CO <sub>2</sub> Na	324	dec a
Ethylamine	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> NH <sub>2</sub>	-80	17
Diethyl ether	(CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> O	-116	34.6
Ethyl acetate	CH <sub>3</sub> CO <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-84	77

# Propriedades Químicas e Físicas de halogenetos de alquila, álcoois e éteres

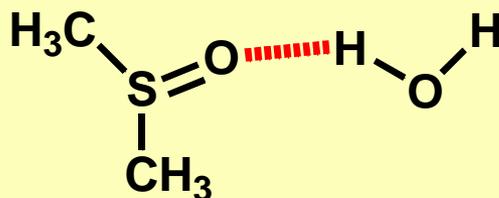
- **No processo de solvatação, as interações eletrostáticas e dipolo-dipolo (ver adiante) são particularmente importantes.**
- **Compostos que podem formar ligações hidrogênio irão solvatar substâncias do mesmo tipo.**
- **Idem para compostos que não formam ligações hidrogênio.**
- **Compostos de natureza diferente em geral não se solvatam (não são miscíveis).**

# Propriedades Químicas e Físicas de halogenetos de alquila, álcoois e éteres

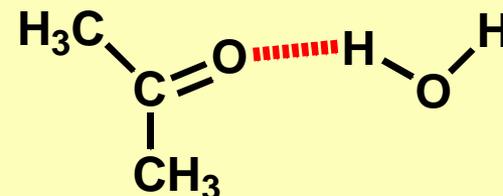
Miscibilidade outros solventes + H<sub>2</sub>O → importante: tamanho da cadeia e natureza do grupo polar



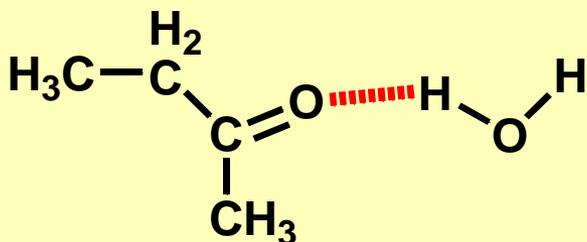
acetonitrila-H<sub>2</sub>O  
totalmente miscível



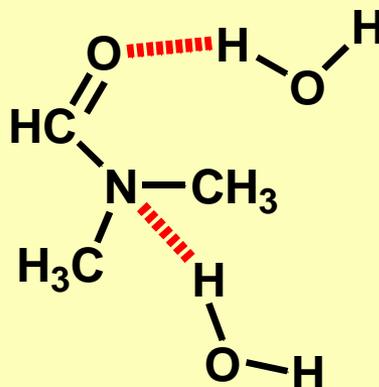
dimetilsulfóxido-H<sub>2</sub>O  
totalmente miscível



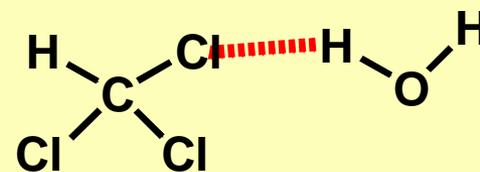
acetona-H<sub>2</sub>O  
totalmente miscível



butanona-H<sub>2</sub>O  
muito pouco miscível



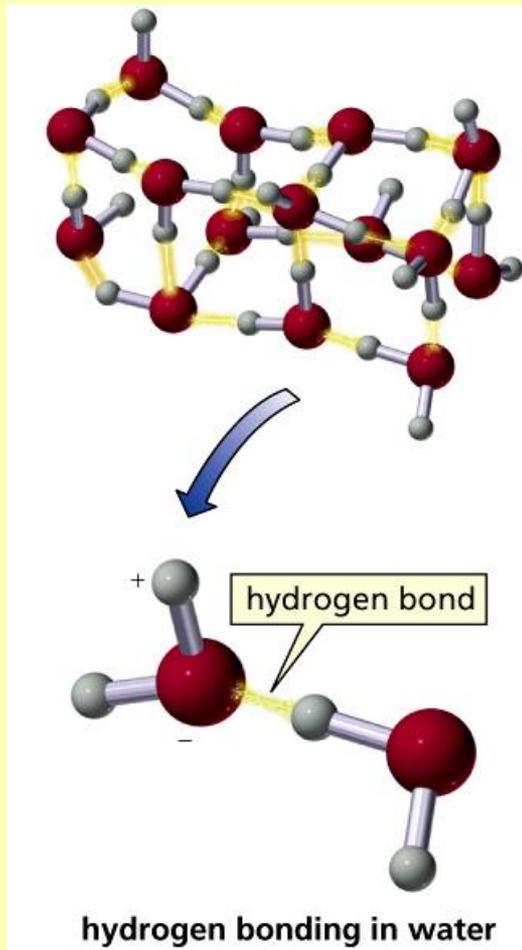
dimetilformamida-H<sub>2</sub>O  
totalmente miscível



clorofórmio-H<sub>2</sub>O  
imiscível

# Propriedades Químicas e Físicas de halogenetos de alquila, álcoois e éteres

Na verdade, ligações hidrogênio resultam de **fortes interações dipolares**.



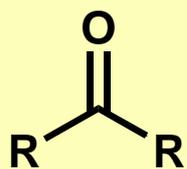
Água:

- alto ponto de ebulição
- Alto ponto de fusão
- alta constante dielétrica
- alto calor específico
- alta tensão superficial

Tudo por causa das ligações hidrogênio.

# Propriedades Químicas e Físicas de halogenetos de alquila, álcoois e éteres

As **interações dipolo-dipolo** também determinam as constantes físicas e propriedades químicas (miscibilidade, solubilidade, pKa, acidez-basicidade) **de solventes que não apresentam grupo polar com hidrogênio**, mas que também são polares.



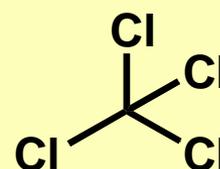
cetonas



diclorometano

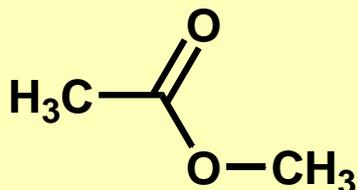


clorofórmio

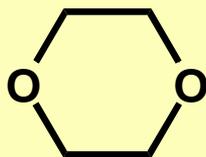


tetracloroeto de carbono

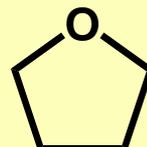
**solventes clorados: tóxicos e nocivos ao ambiente**



acetato de etila  
éster



dioxano  
éter cíclico  
**tóxico**



tetrahidrofurano (THF)  
éter cíclico  
**tóxico**

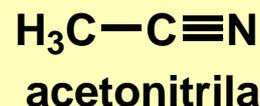
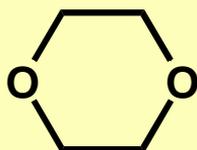
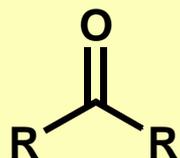
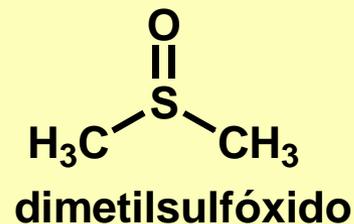
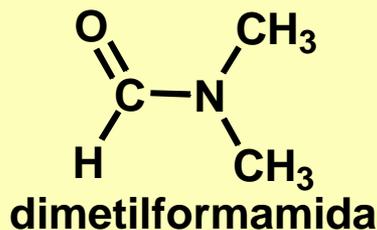


acetoneitrila  
nitrila  
**tóxico**

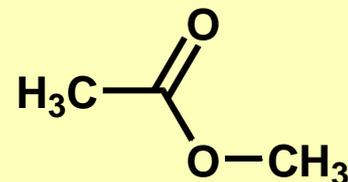
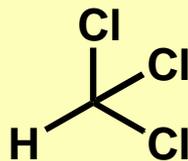
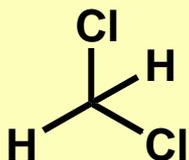
# Propriedades Químicas e Físicas de halogenetos de alquila, álcoois e éteres

**Solventes polares apróticos** (sem hidrogênio no grupo polar) e miscibilidade com H<sub>2</sub>O

**miscíveis**



**imiscíveis**



**Todos são miscíveis entre si**

# Solubilidade de éteres com H<sub>2</sub>O

- Estritamente dependente do tamanho da cadeia de carbonos

Table 2.7 Solubilities of Ethers in Water

2 C's	CH <sub>3</sub> OCH <sub>3</sub>	soluble
3 C's	CH <sub>3</sub> OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	soluble
4 C's	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	slightly soluble (10 g/100 g H <sub>2</sub> O)
5 C's	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	minimally soluble (1.9 g/100 g H <sub>2</sub> O)
6 C's	CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	insoluble (0.25 g/100 g H <sub>2</sub> O)

# Solubilidade de halogenetos de alquila em $\text{H}_2\text{O}$

- Estritamente dependente do tamanho da cadeia de carbonos e da eletronegatividade do halogênio.

**Table 2.8 Solubilities of Alkyl Halides in Water**

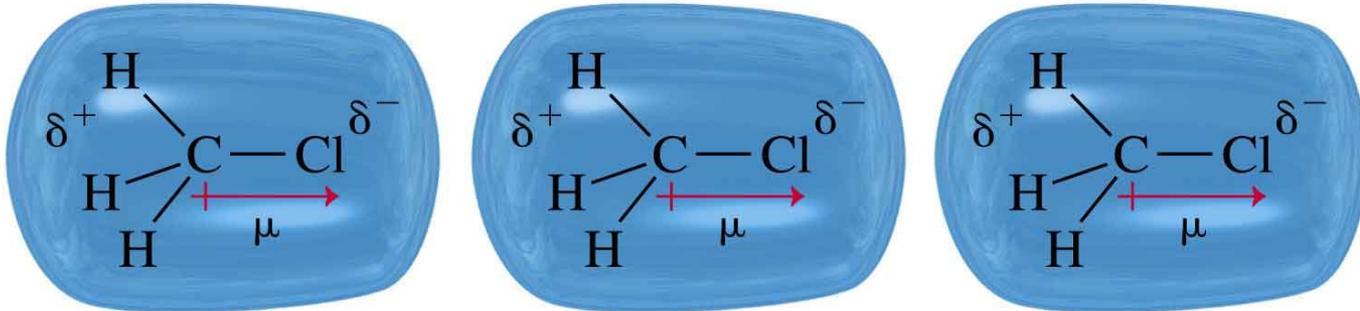
$\text{CH}_3\text{F}$ very soluble	$\text{CH}_3\text{Cl}$ soluble	$\text{CH}_3\text{Br}$ slightly soluble	$\text{CH}_3\text{I}$ slightly soluble
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{F}$ soluble	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl}$ slightly soluble	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{Br}$ slightly soluble	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{I}$ slightly soluble
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{F}$ slightly soluble	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$ slightly soluble	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Br}$ slightly soluble	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{I}$ slightly soluble
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{F}$ insoluble	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Cl}$ insoluble	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Br}$ insoluble	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{I}$ insoluble

## Propriedades Químicas e Físicas de halogenetos de alquila, álcoois e éteres

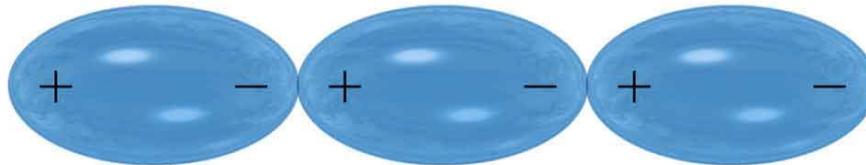
- No caso de hidrocarbonetos saturados e insaturados (ver adiante), as interações intermoleculares são apenas do tipo “**dipolo induzido**”, também denominadas **forças de Van der Waals** ou forças de London.
- Estas forças resultam da **interação entre superfícies** moleculares.

# Dipolo Permanente

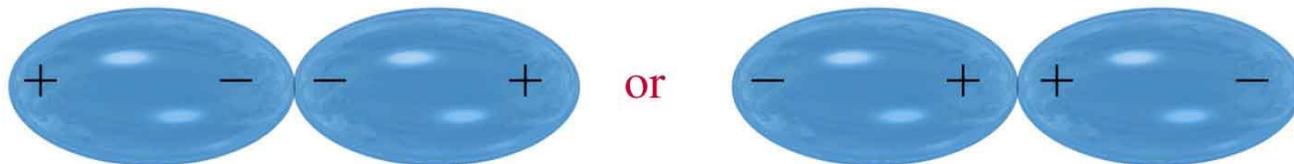
*attraction (common)*



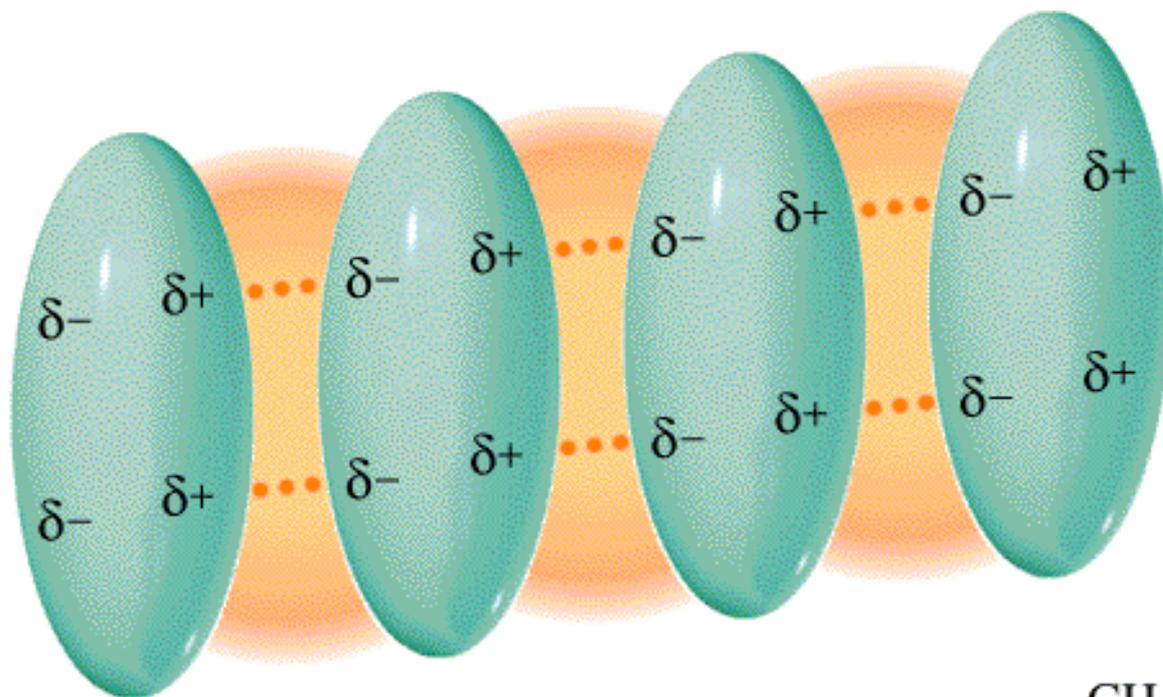
*symbolized by*



*repulsion (uncommon)*



# Interações de dipolo induzido ou forças de Van der Waals



$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$   
**pentane**  
**bp = 36.1 °C**

$\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$   
**isopentane**  
**bp = 27.9 °C**

$\text{CH}_3\text{C}(\text{CH}_3)_3$   
**neopentane**  
**bp = 9.5 °C**

# Comparação de constantes físicas e interações de dipolo e de Van der Waals.

**Table 2.5 Comparative Boiling Points of Alkanes, Ethers, Alcohols, and Amines (°C)**

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$ -42.1	$\text{CH}_3\text{OCH}_3$ -23.7	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ 78	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2$ 16.6
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ -0.5	$\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}_3$ 10.8	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ 97.4	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$ 47.8
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ 36.1	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_3$ 34.5	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$ 117.3	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$ 77.8

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NH}_2$   
**pentylamine**  
 a primary amine  
 bp = 104 °C

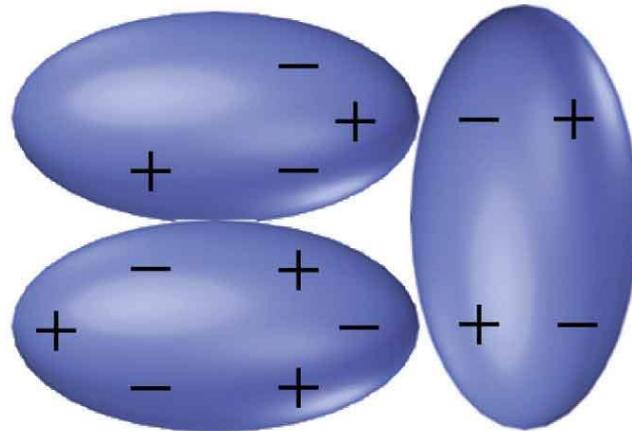
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$   
**ethylpropylamine**  
 a secondary amine  
 bp = 90 °C

$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ | \\ \text{CH}_3\text{CH}_2\text{NCH}_2\text{CH}_3 \end{array}$   
**diethylmethylamine**  
 a tertiary amine  
 bp = 66 °C

# Interações atrativas entre moléculas apolares → forças de London.



random temporary dipoles when separated

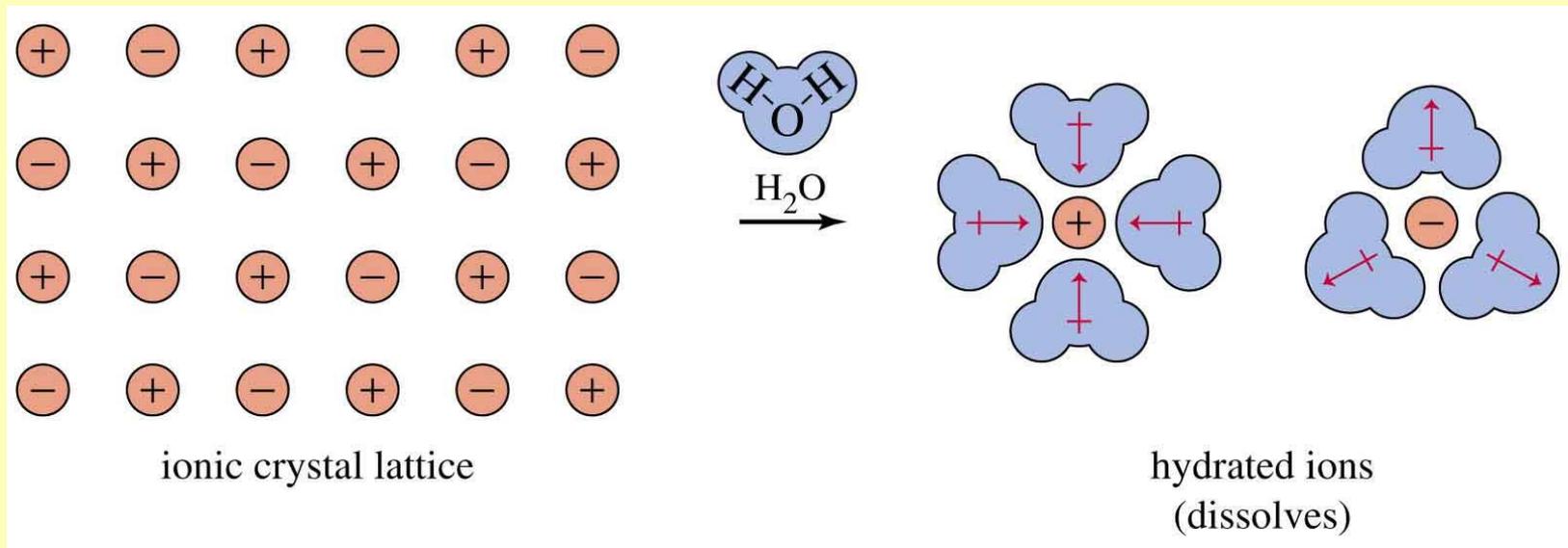


correlated temporary dipoles when in contact

# Solubilidade e Miscibilidade

- Similar dissolve similar
- Solutos polares são solúveis em solventes polares
- Solutos apolares são solúveis em solventes apolares
- Moléculas que apresentam forças intermoleculares similares serão miscíveis.

# Soluto iônico e solvente polar



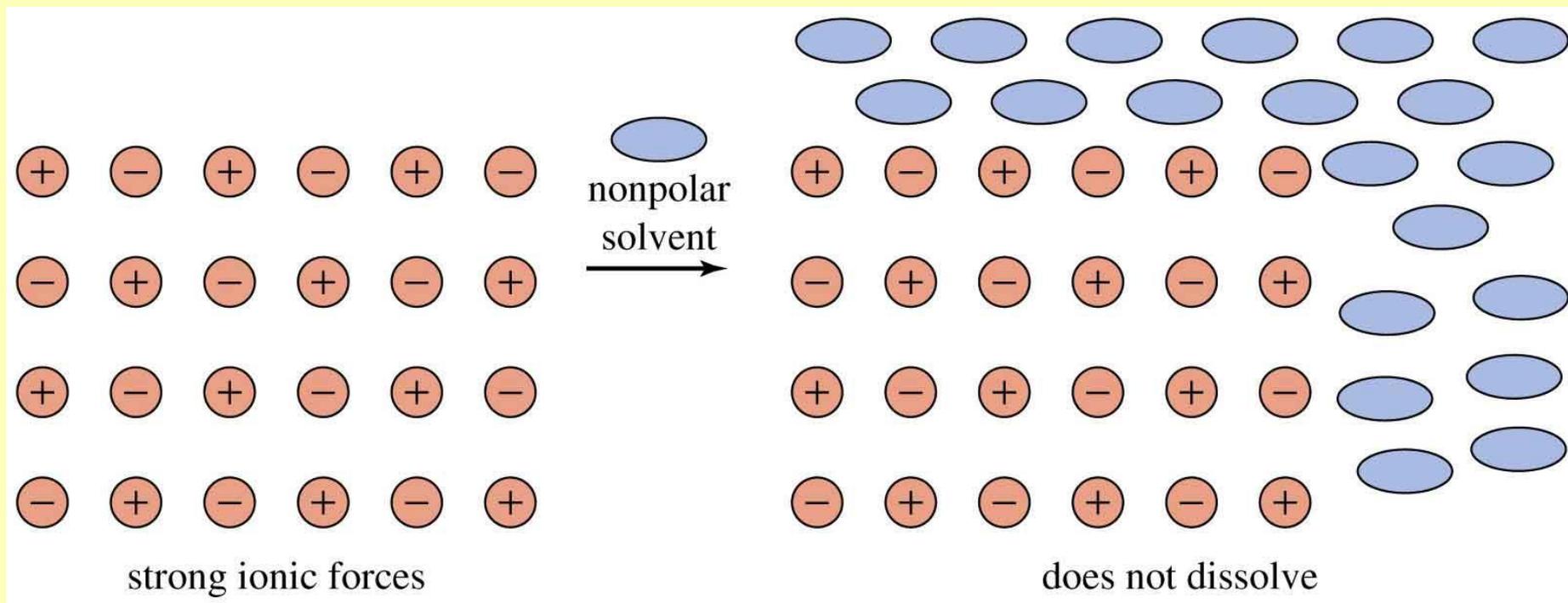
**Hidratação libera energia → exotérmico**

**Aumento da entropia**

⇒

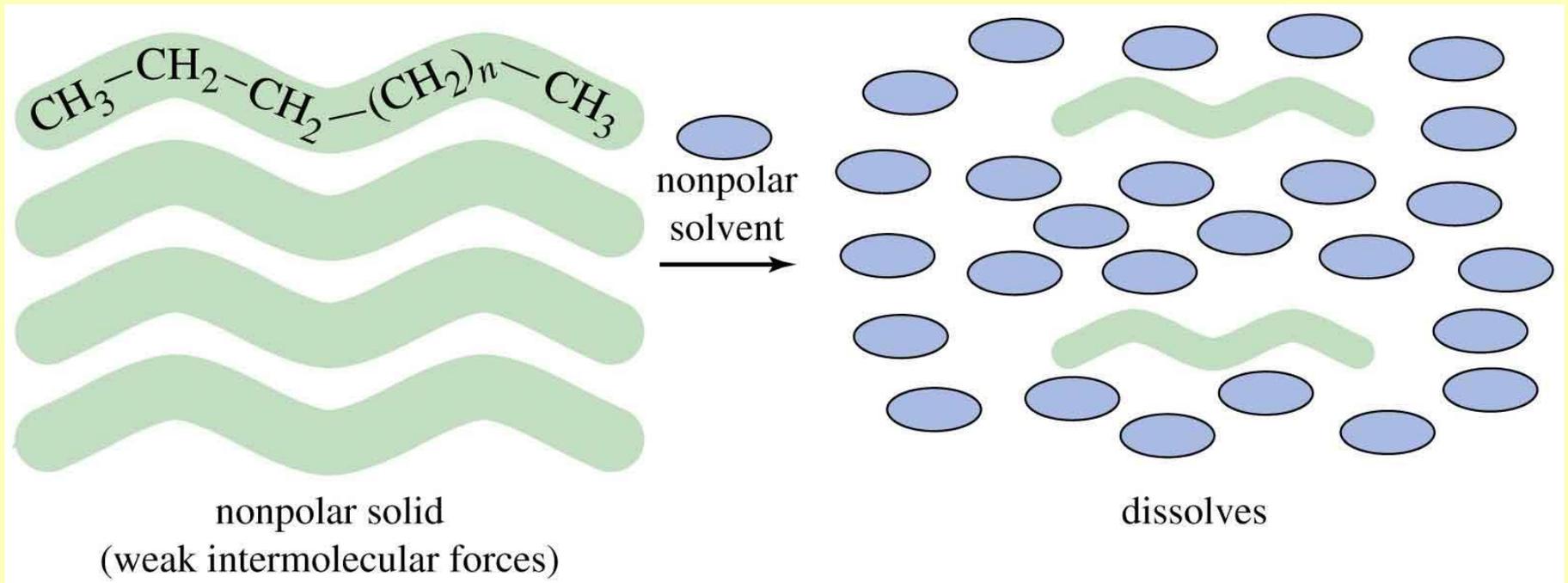
**Processo energeticamente favorável**

# Soluto iônico com solvente apolar

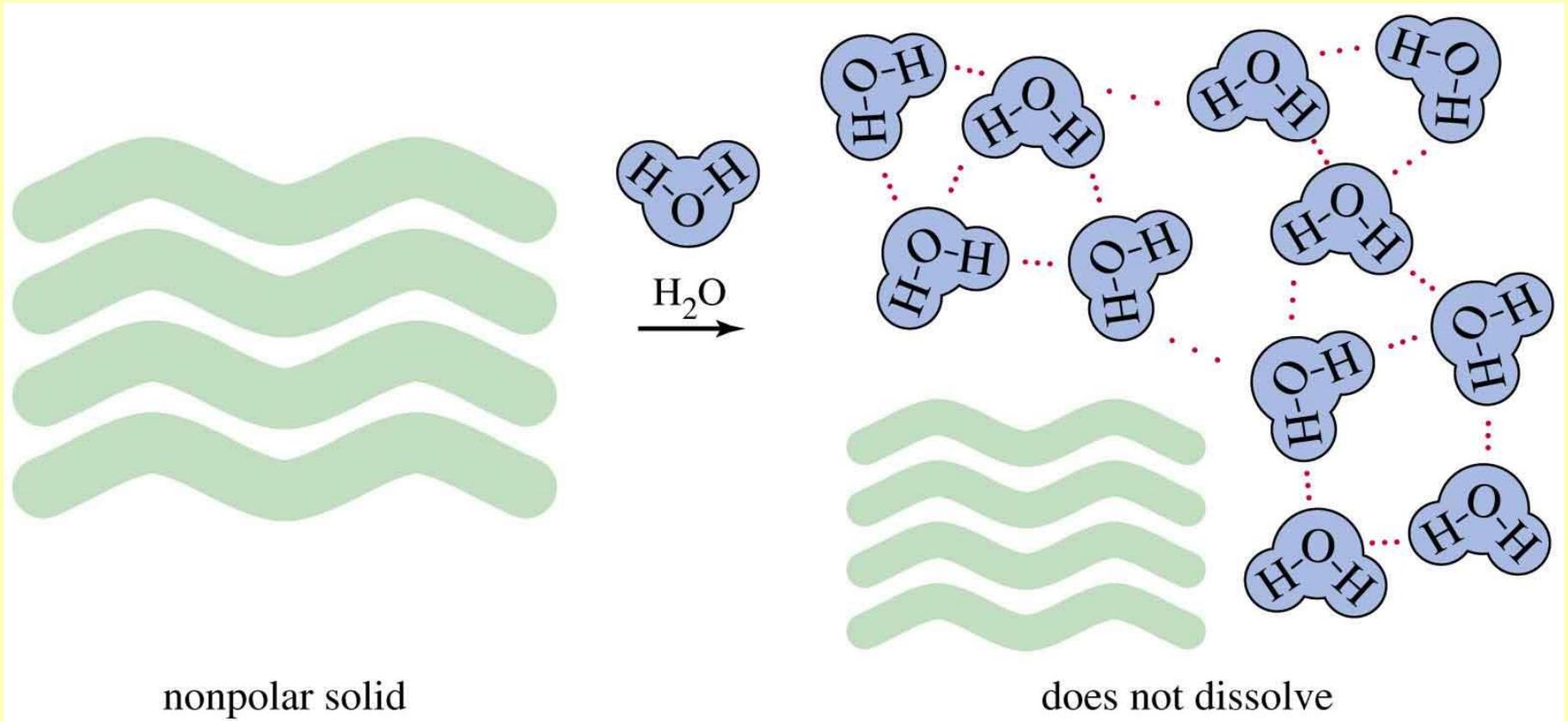


Solventes apolares: hidrocarbonetos, halogenetos de alquila, Álcoois de cadeia longa

# Soluto apolar com solvente apolar



# Soluto apolar com solvente polar

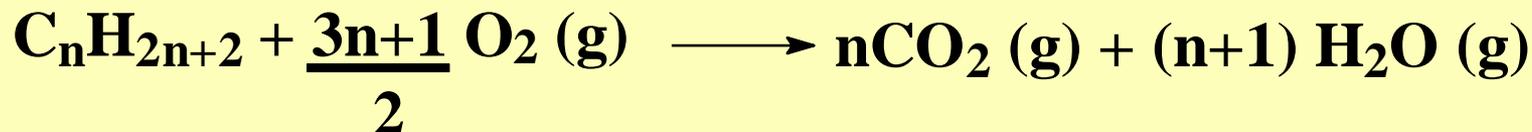


Solventes polares:  $\text{H}_2\text{O}$ , álcoois inferiores, ácidos inferiores

# Estruturas, Propriedades, Utilidades e Síntese de Alcanos

## Aplicações e utilização de alcanos

### Combustíveis



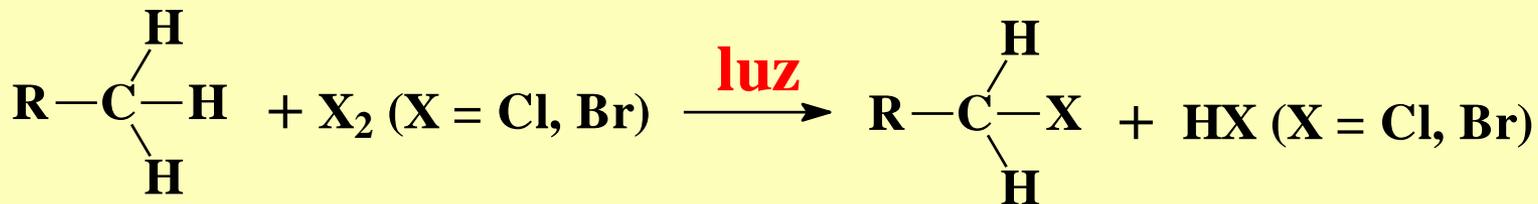
energia proveniente da combustão de alcanos:

~ 148 kcal/mol por grupo  $\text{CH}_2$

# Estruturas, Propriedades, Utilidades e Síntese de Alcanos

## Aplicações e utilização de alcanos

### Preparação de derivados halogenados e nitrados



$\text{ClCH}_3$ ,  $\text{ClFCH}_2$ ,  $\text{Cl}_2\text{FCH}$ ,  $\text{Cl}_2\text{F}_2\text{C}$  (clorofluorocarbonos, CFCs, refrigeração)

$\text{Cl}_2\text{CH}_2$  (diclorometano),  $\text{Cl}_3\text{CH}$  (clorofórmio),  $\text{Cl}_4\text{C}$  (tetracloreto de carbono),

$\text{ClCH}_2\text{-CH}_2\text{Cl}$  (1,2-dicloroetano),  $\text{Cl}_2\text{CH-CH}_3$  (1,1-dicloroetano): solvente

# Estruturas, Propriedades, Utilidades e Síntese de Alcanos

## Petróleo

### 1 **Petróleo: fonte primária de insumos químicos**

- fonte primária de solventes
- matéria-prima para a preparação de reagentes orgânicos
- matéria-prima para a preparação de polímeros
- principal fonte primária de energia

**Petróleo**  **Indústria Química**

### 2 **Petróleo e Sociedade**

- consumo
- desperdício
- desenvolvimento sustentado



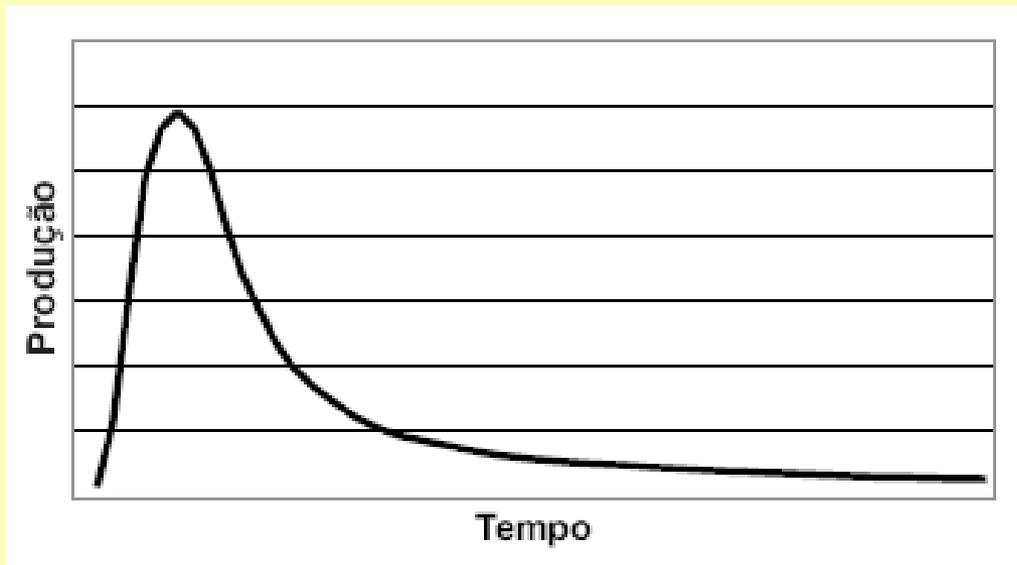
# Estruturas, Propriedades, Utilidades e Síntese de Alcanos

## Petróleo

### 3 **Petróleo: perspectivas futuras**

- disponibilidade: até quando?
- alternativas
- conservação e biodiversidade

### Curva Natural de Extração de Petróleo x Tempo



# Estruturas, Propriedades, Utilidades e Síntese de Alcanos

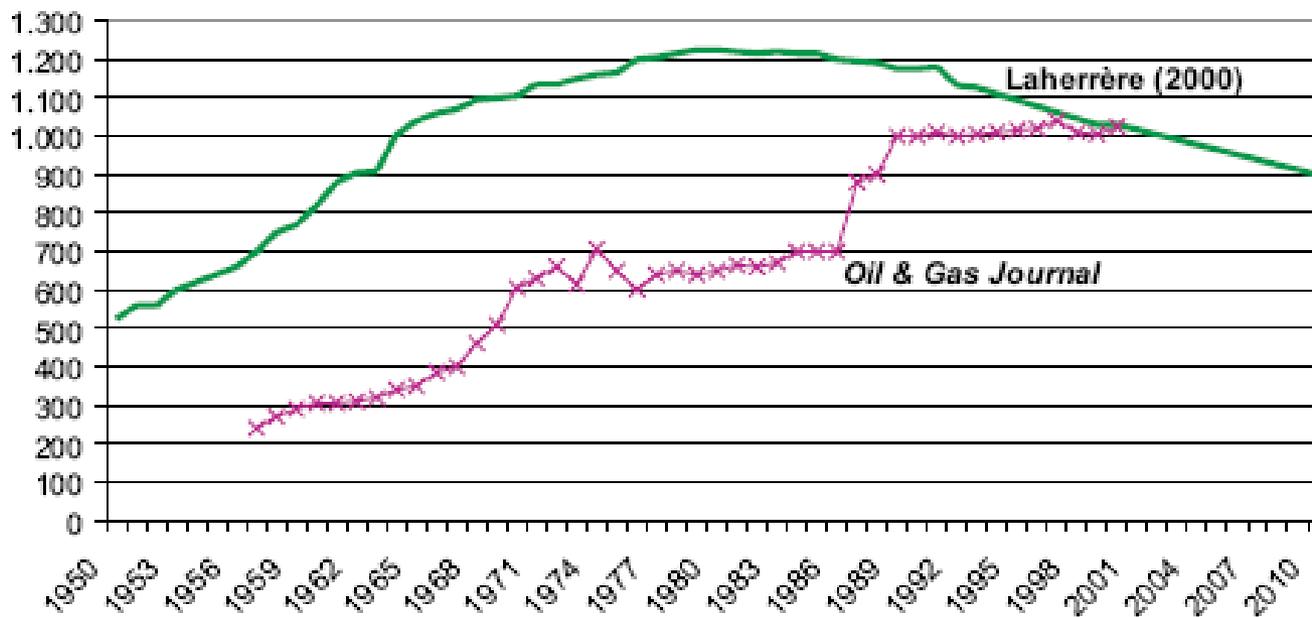
## Petróleo

### 3 Petróleo: perspectivas futuras

Gráfico 4

Reservas Mundiais de Petróleo segundo Estimativas do *Oil & Gas Journal* e de Laherrère (2000) – 1950/2010

(Em Bilhões de Barris)



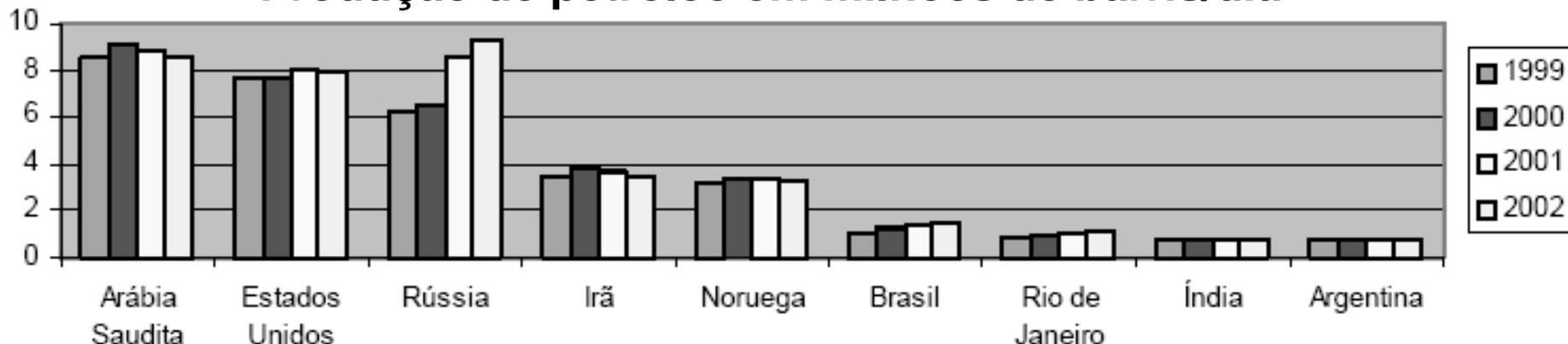
Fonte: Laherrère (2000).

# Estruturas, Propriedades, Utilidades e Síntese de Alcanos

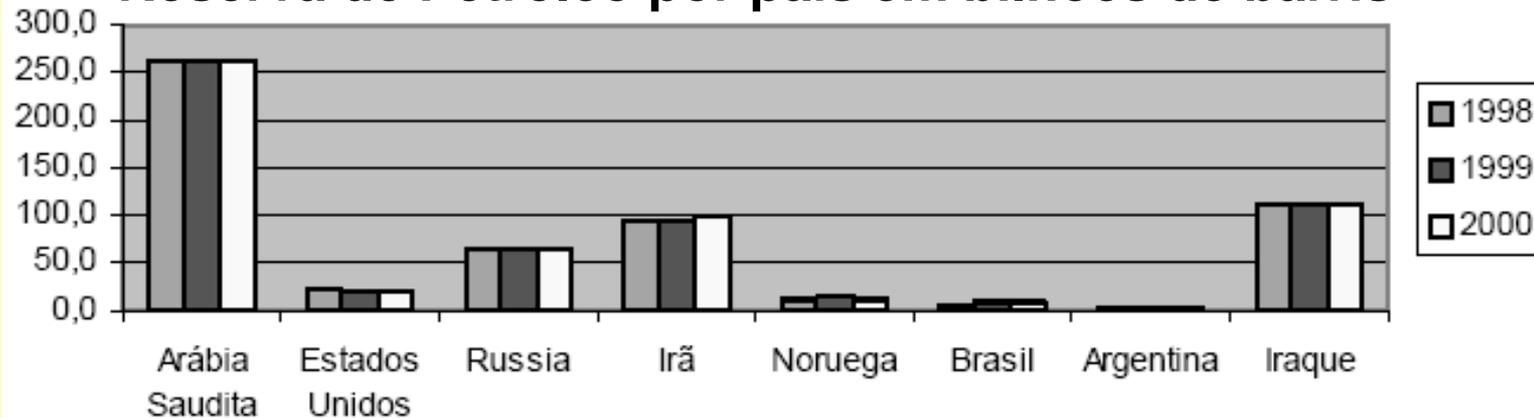
## Petróleo

### 4 Brasil e Petróleo

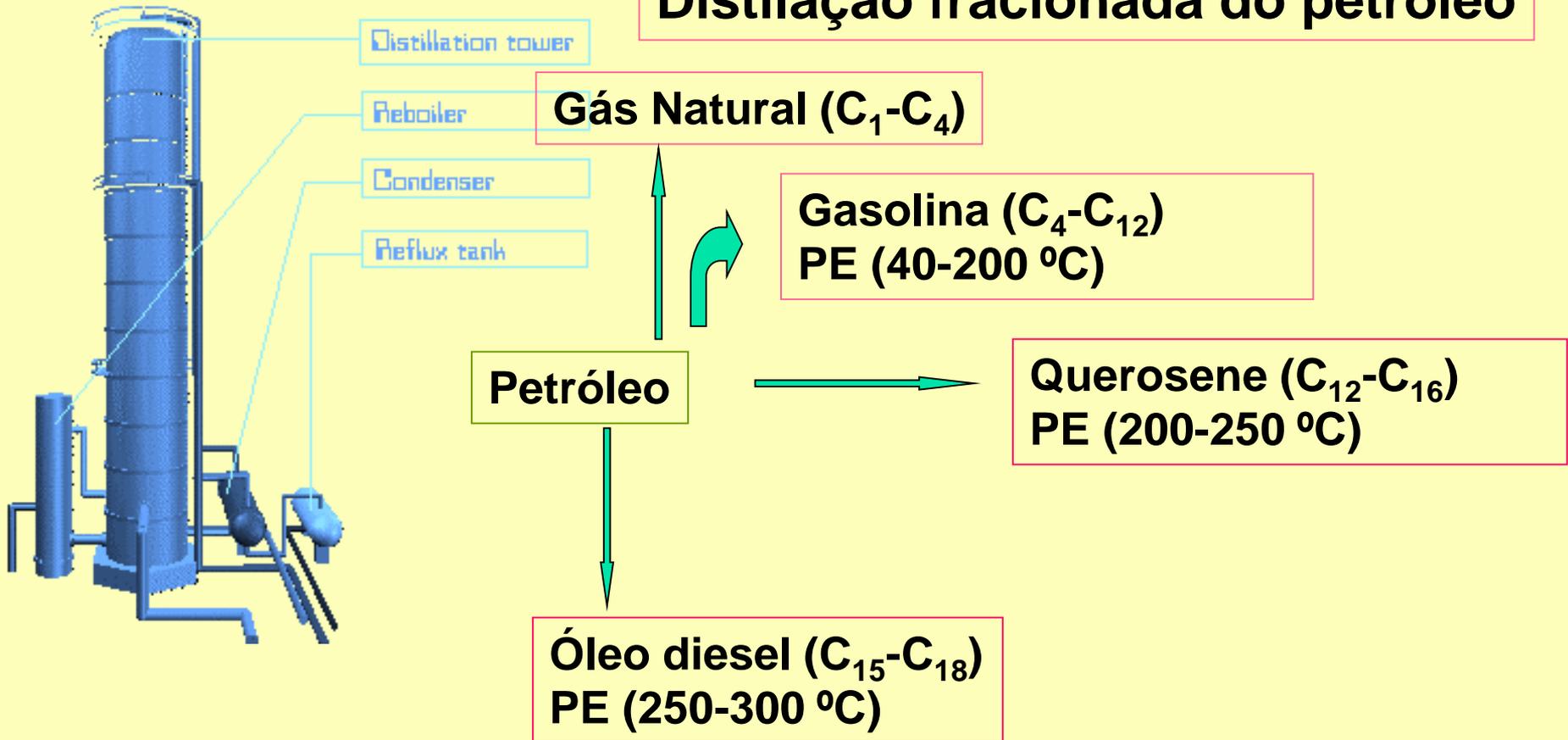
Produção de petróleo em milhões de barris/dia



Reserva de Petróleo por país em bilhões de barris



# Distilação fracionada do petróleo



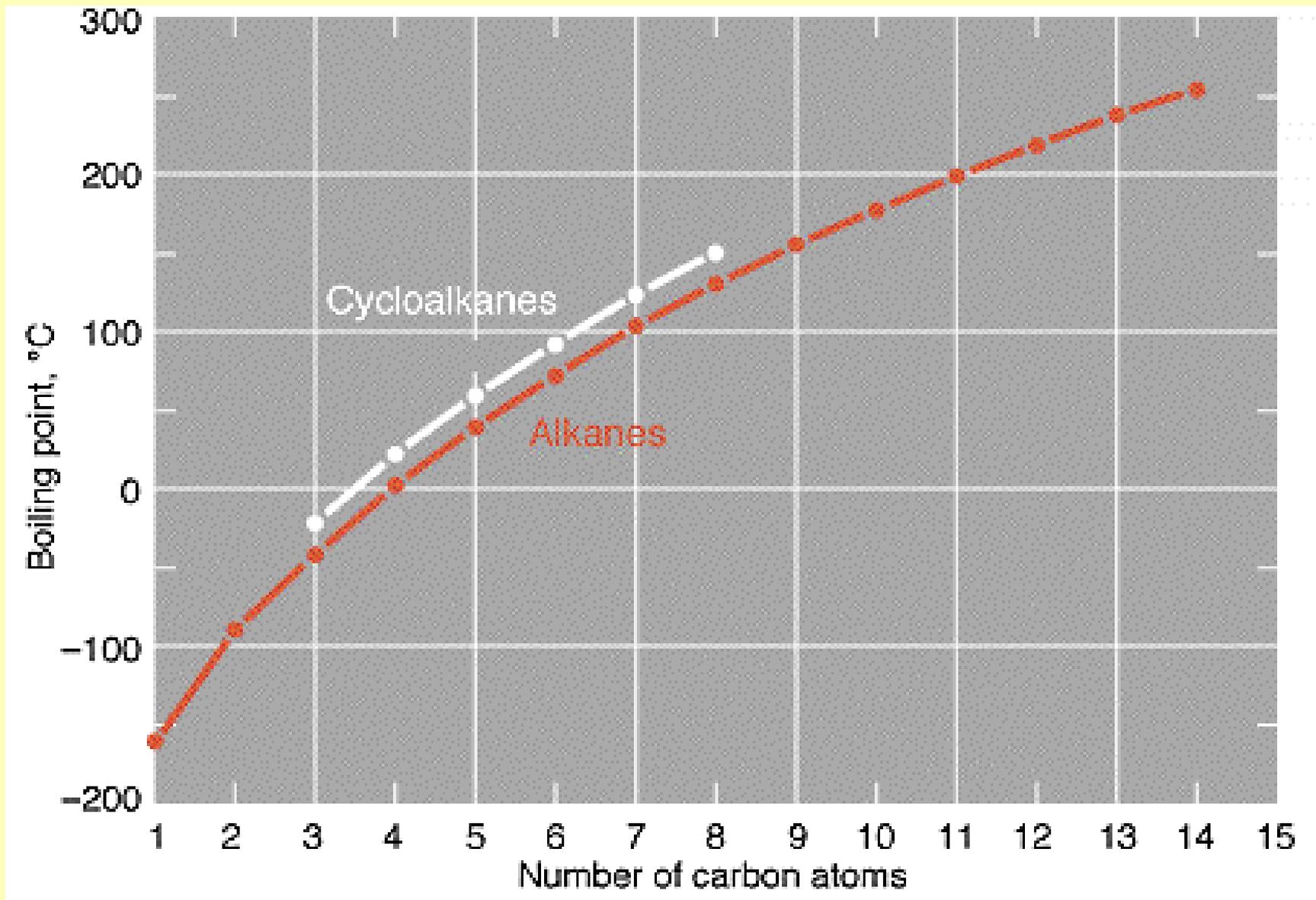
# Composição química do petróleo

Fração	número de carbonos	Faixa da temperatura de ebulição
<b>Gasolina natural (leve)</b>		
Gás natural	$C_1 - C_4$	menor que a temperatura ambiente
<b>Destilados leves</b>		
Éter de petróleo	$C_5 - C_6$	0 - 60 °C
Ligroína	$C_6 - C_7$	60 - 100 °C
Gasolina	$C_7 - C_{12}$	50 - 200 °C
Querosene	$C_{12} - C_{18}$	175 - 325 °C
<b>Destilados médios</b>		
Óleos combustíveis	$> C_{18}$	300 - 500 °C
Óleo diesel		
Gasóleos		
<b>Destilados pesados</b>		
Óleos minerais pesados	$> C_{30}$	destilação à vácuo
Ceras		a temperaturas maiores
Óleos lubrificantes		que 400 °C

# Propiedades físicas de alcanos

NUMB OF CARBON ATOMS	NAME	bp (°C) (1 atm)	mp (°C)	DENSITY d 20 (g mL <sup>-1</sup> )
1	Methane	-161.5	-182	
2	Ethane	-88.6	-183	
3	Propane	-42.1	-188	
4	Butane	-0.5	-138	
5	Pentane	36.1	-130	0.626
6	Hexane	68.7	-95	0.659
7	Heptane	98.4	-91	0.684
8	Octane	125.7	-57	0.703
9	Nonane	150.8	-54	0.718
10	Decane	174.1	-30	0.730
11	Undecane	195.9	-26	0.740
12	Dodecane	216.3	-10	0.749
13	Tridecane	235.4	-5.5	0.756
14	Tetradecane	253.5	6	0.763
15	Pentadecane	270.5	10	0.769
16	Hexadecane	287	18	0.773
17	Heptadecane	303	22	0.778
18	Octadecane	316.7	28	0.777
19	Nonadecane	330	32	0.777
20	Eicosane	343	36.8	0.789

# Pontos de ebulição de alcanos não-ramificados (vermelho) e de cicloalcanos (branco)

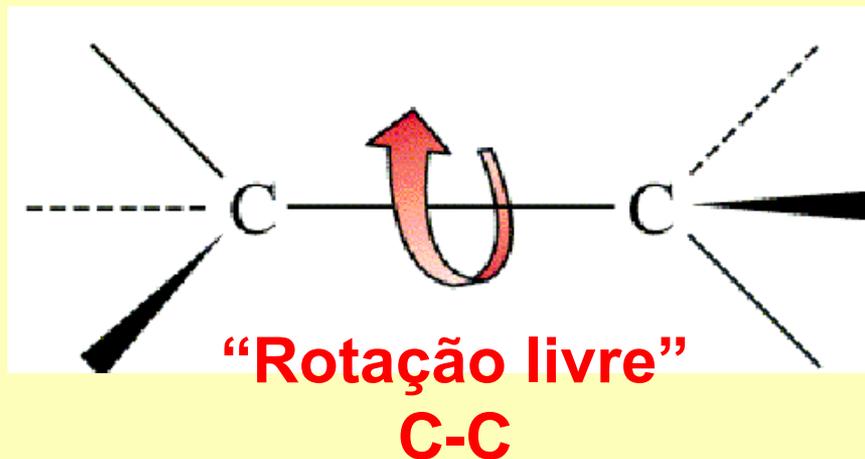


# Estrutura dos Alcanos

## Conformação dos alcanos

### “Rotação Livre” em torno da ligação C-C

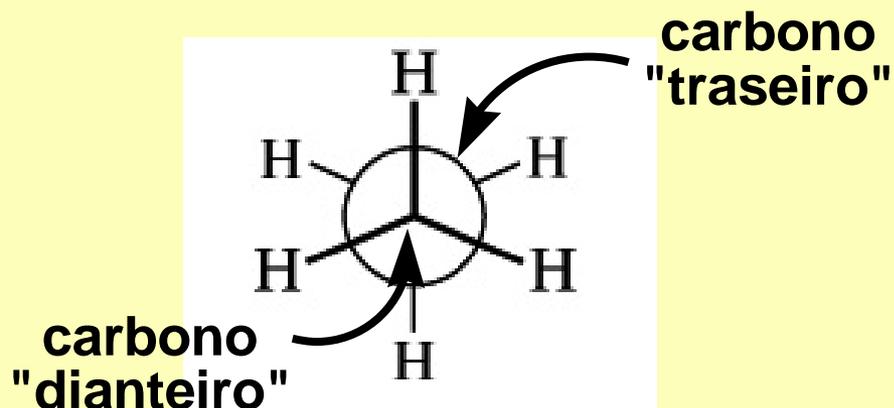
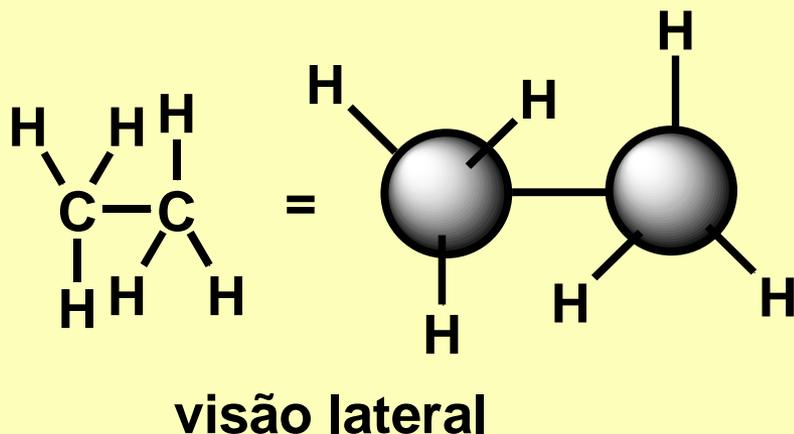
- Diferentes arranjos espaciais que resultam da rotação da ligação C-C nos alcanos constituem diferentes **conformações**.
- Conformações diferentes também são chamadas **confômeros** ou **isômeros conformacionais**.



# Estrutura dos Alcanos

## Projeções de Newman

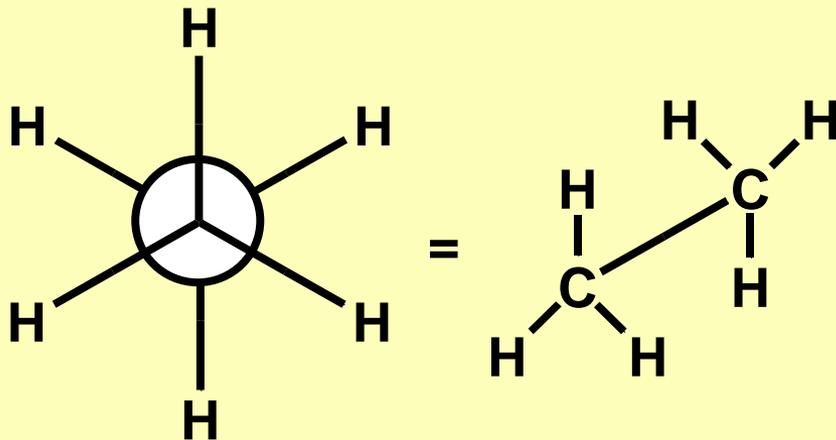
- Uma maneira conveniente para descrever a conformação dos alcanos é visualizar a molécula “de frente”, ao longo do eixo da ligação C-C → Projeção de Newman



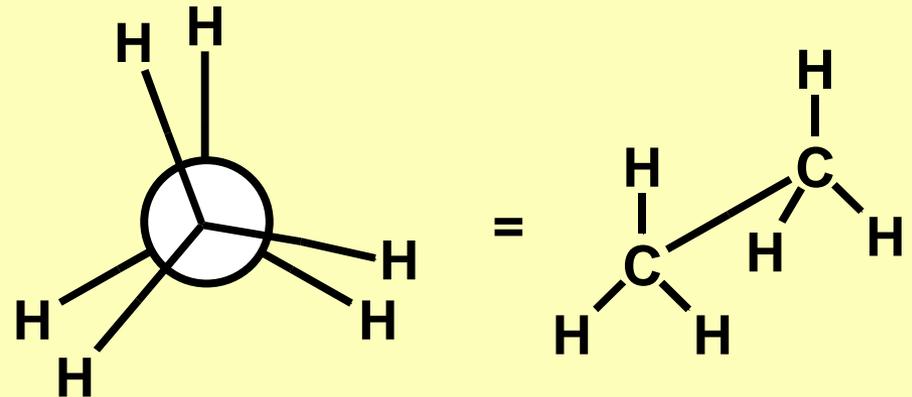
# Conformação dos Alcanos

## Rotação em Ligações C-C ( $\sigma$ , sigma)

- Quando os átomos de C do etano realizam rotação em torno da ligação C-C, surgem duas conformações principais:
  - Conformação eclipsada
  - Conformação em oposição



conformação  
em oposição



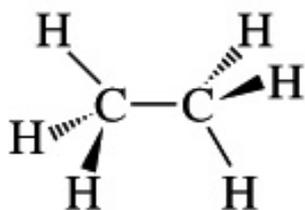
conformação  
eclipsada

# Conformação dos Alcanos

## Rotação em Ligações C-C ( $\sigma$ , sigma)

Fórmula em perspectiva

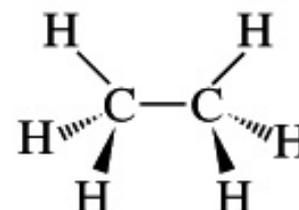
Conformação em oposição



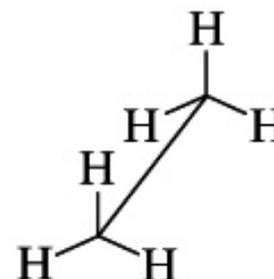
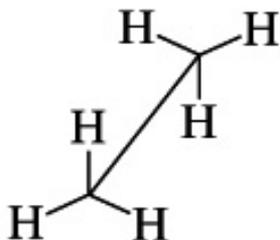
rotação



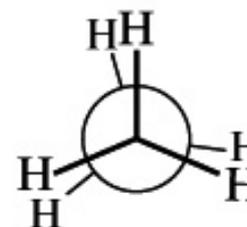
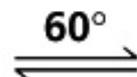
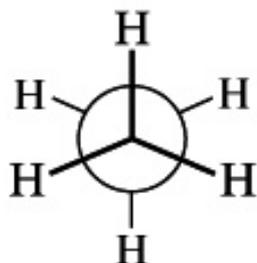
Conformação eclipsada



Fórmulas tridimensionais



Projeções de Newman



# Conformação dos Alcanos

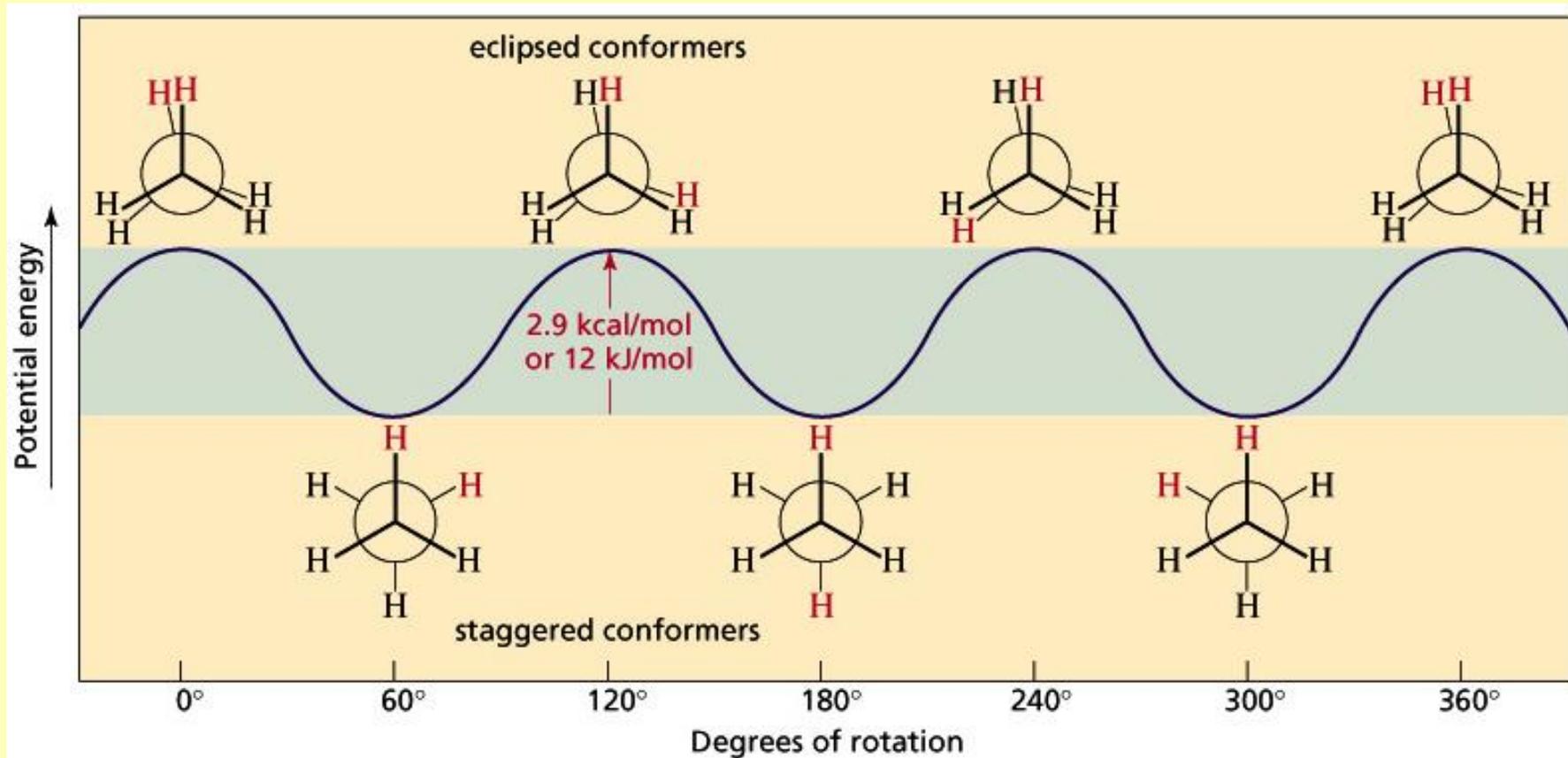
## Rotação em Ligações C-C ( $\sigma$ , sigma)

- A rotação em torno da ligação C-C do etano não é completamente livre
- Os elétrons das ligações C-H apresentam repulsão entre si, caso estas ligações estejam próximas (conformação eclipsada).
- Por esta razão, **a conformação eclipsada apresenta maior energia do que a conformação em oposição.**

# Conformação dos Alcanos

## Rotação em Ligações C-C ( $\sigma$ , sigma)

A “energia extra” ou o “excesso de energia” da conformação eclipsada é denominada **barreira torsional**, e é da ordem de 2,8 kcal/mol (12 kJ/mol) para a ligação C-C do etano.

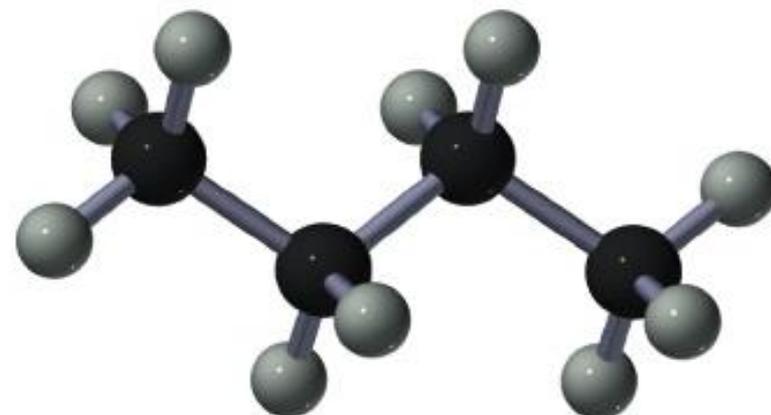
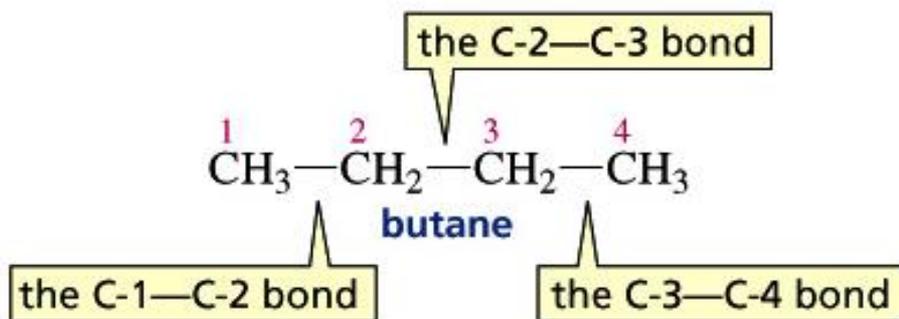


# Conformação dos Alcanos

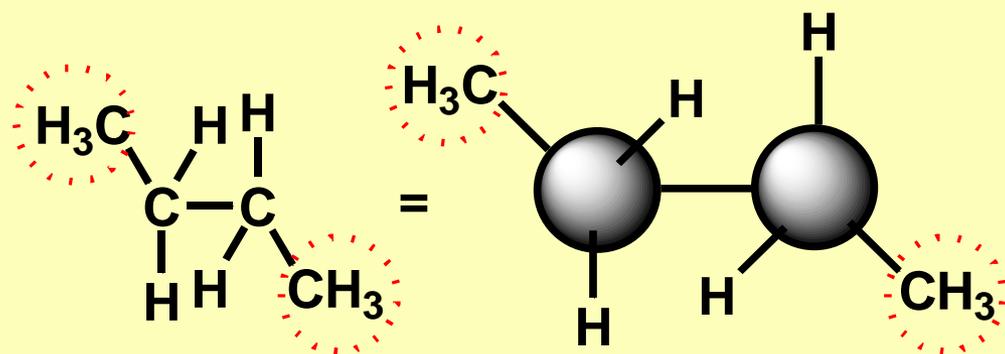
## Rotação em Ligações C-C ( $\sigma$ , sigma)

- O mesmo raciocínio pode ser aplicado a outros alcanos, como o butano.
- Devido ao **volume** dos grupos metila ( $\text{CH}_3$ ) ocorre repulsão, caso estes estejam próximos (conformação eclipsada).
- Por esta razão, **a conformação eclipsada do butano apresenta maior energia do que a conformação em oposição.**

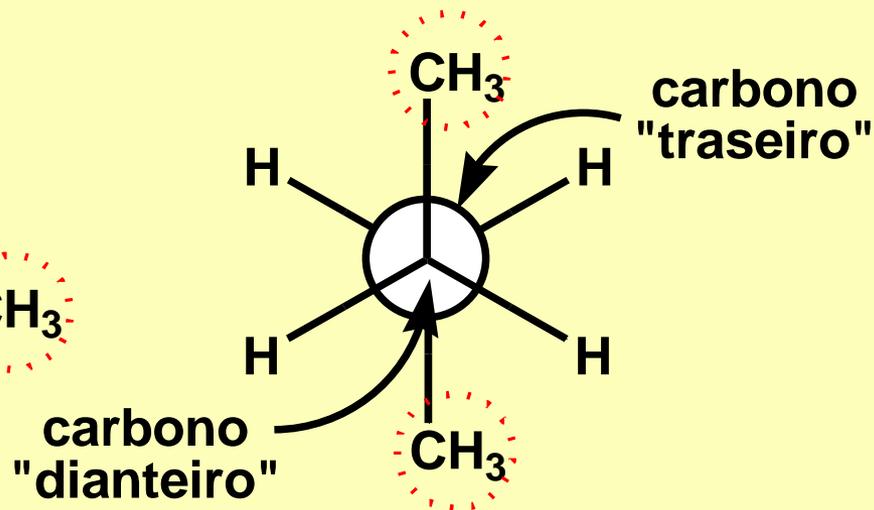
# Estudo Conformacional do Butano



ball-and-stick model of butane



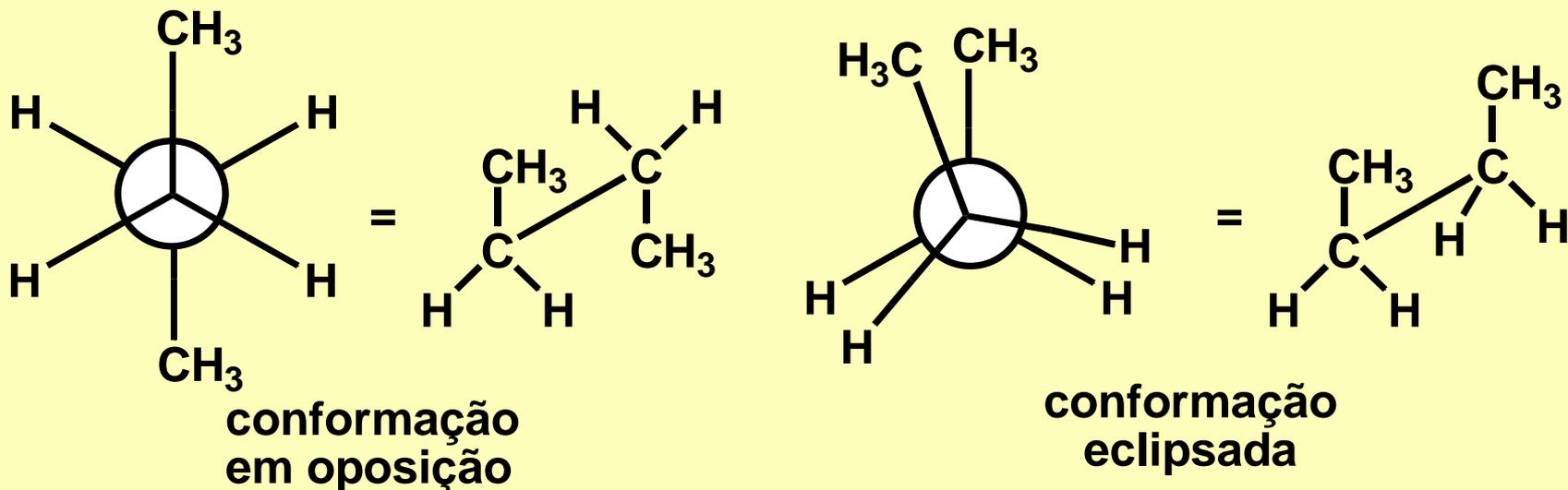
visão lateral



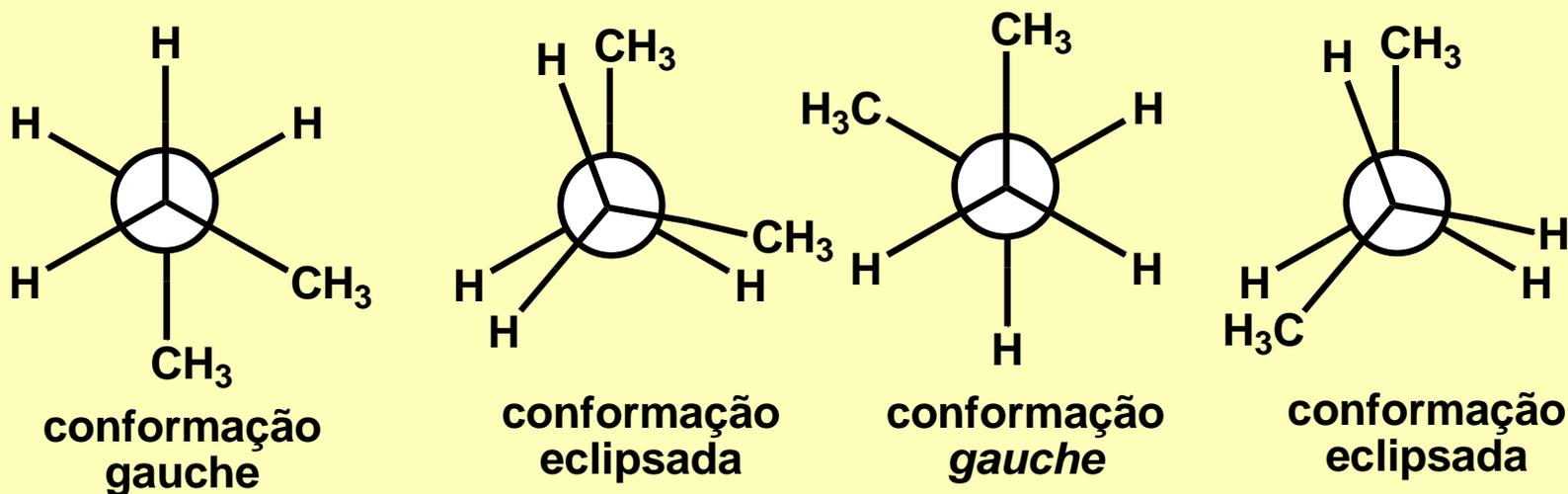
carbono "dianteiro"

carbono "traseiro"

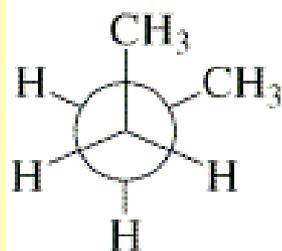
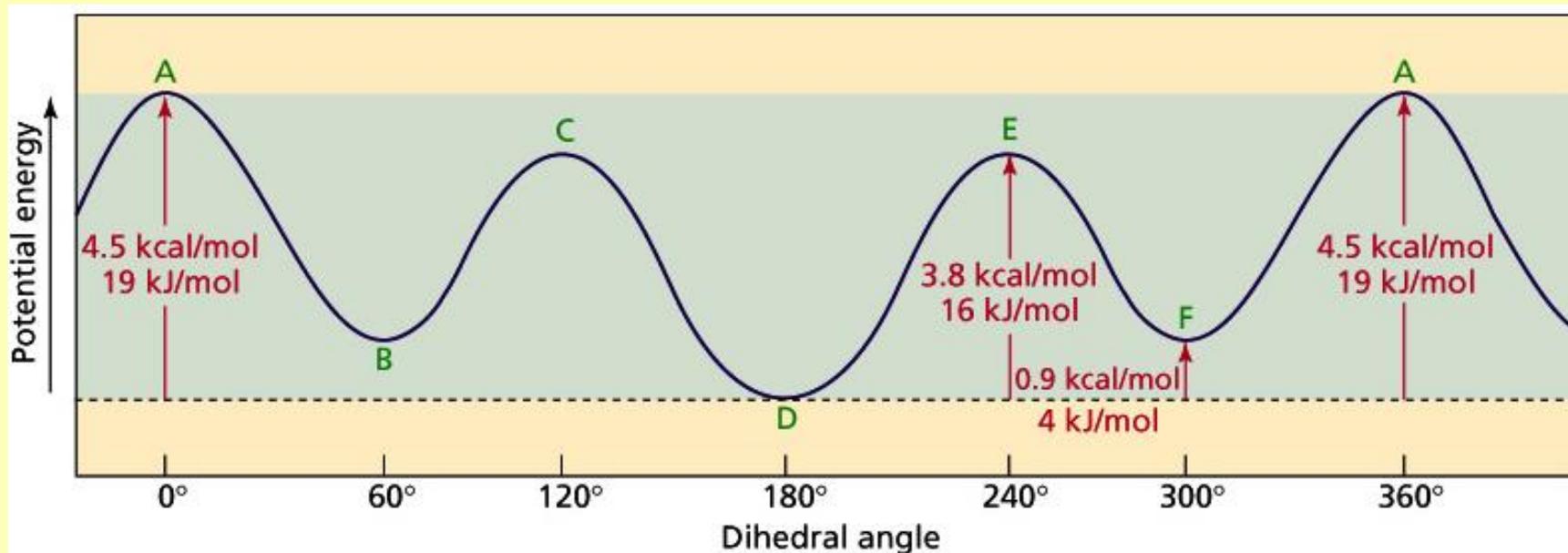
# Estudo Conformacional do Butano



Além destas, outras

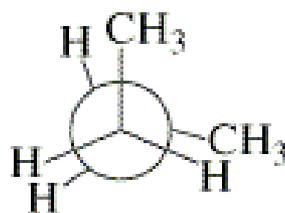


As conformações eclipsadas são sempre de maior energia, especialmente se existe sobreposição dos grupos  $\text{CH}_3$ .



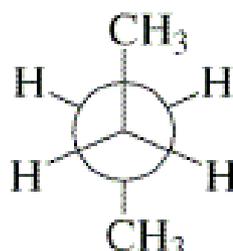
staggered  
gauche

**B**



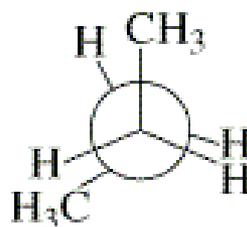
eclipsed

**C**



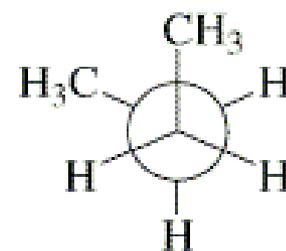
staggered  
anti

**D**



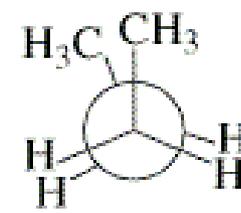
eclipsed

**E**



staggered  
gauche

**F**

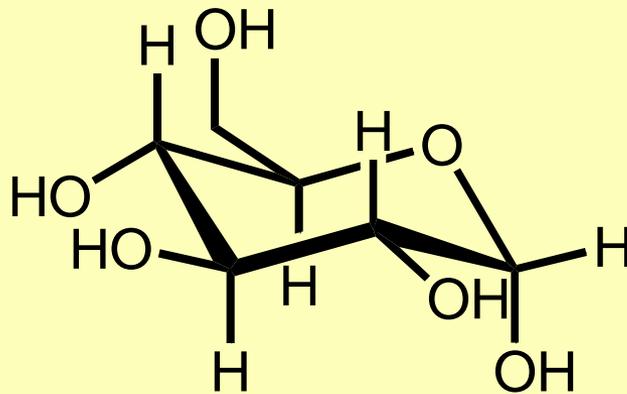


eclipsed

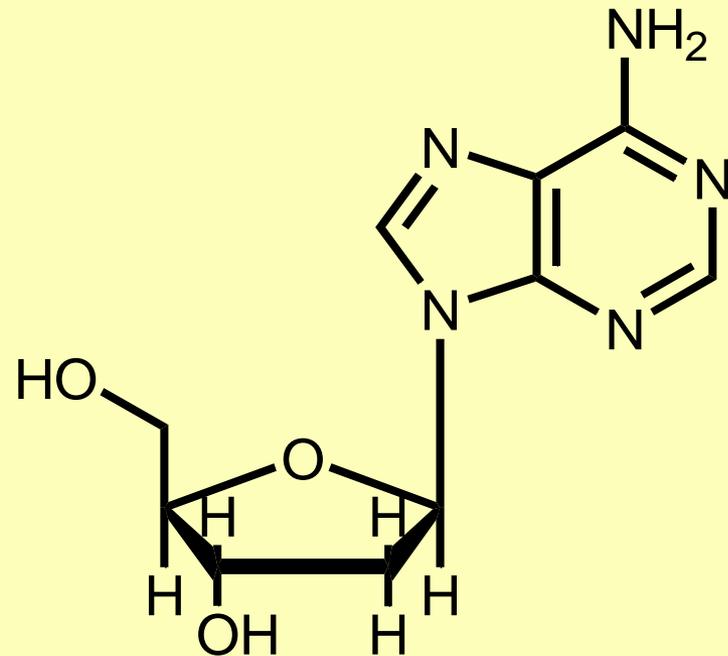
**A**

# Cicloalcanos: estruturas, estabilidades relativas, tensão angular e análise conformacional

- A maioria dos anéis saturados encontrados na natureza são anéis de 6 átomos ou de 5 átomos, como por exemplo as hexoses e pentoses.



**D-glucose**



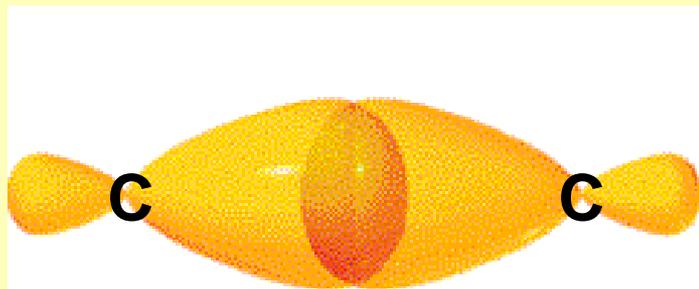
**adenosina**

# Cicloalcanos: estruturas, estabilidades relativas, tensão angular e análise conformacional

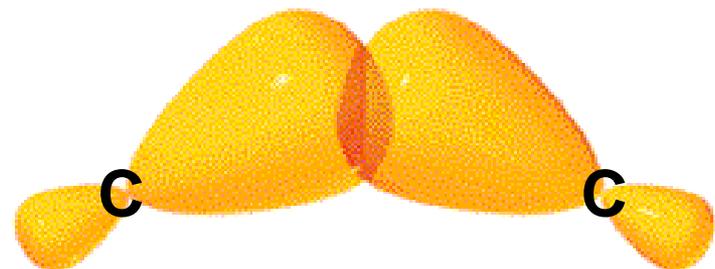
- Razão para este fato → a **estabilidade termodinâmica relativa** de anéis com 5 ou 6 átomos.
- **Anéis com 3, 4, 7, 8** ou mais átomos apresentam uma **menor estabilidade relativa**.
- Razão da diminuição (ou perda) da estabilidade relativa) → desvio dos ângulos de ligação do valor “ideal” de  $109.5^\circ$  do carbono  $sp^3$ .
- Este desvio ocasiona a **tensão angular** de sistemas cíclicos.

# Cicloalcanos: estruturas, estabilidades relativas, tensão angular e análise conformacional

- A tensão angular se origina do desvio do ângulo da ligação C-C-C.
- Causa uma **diminuição na interpenetração**, ou sobreposição (“overlap”) dos orbitais  $sp^3$  dos carbonos que formam os anéis de 3, 4, 7, 8, ou mais átomos.



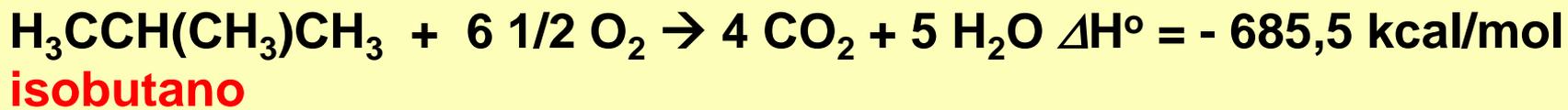
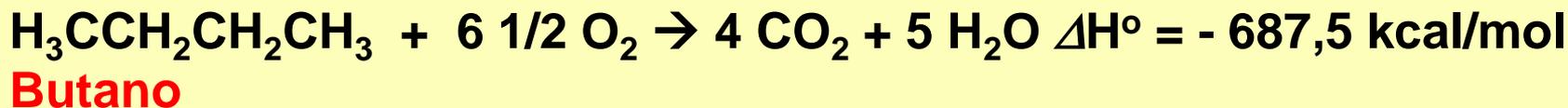
Boa sobreposição  
Ligação forte



Sobreposição ruim  
Ligação mais fraca

# Cicloalcanos: estruturas, estabilidades relativas, tensão angular e análise conformacional

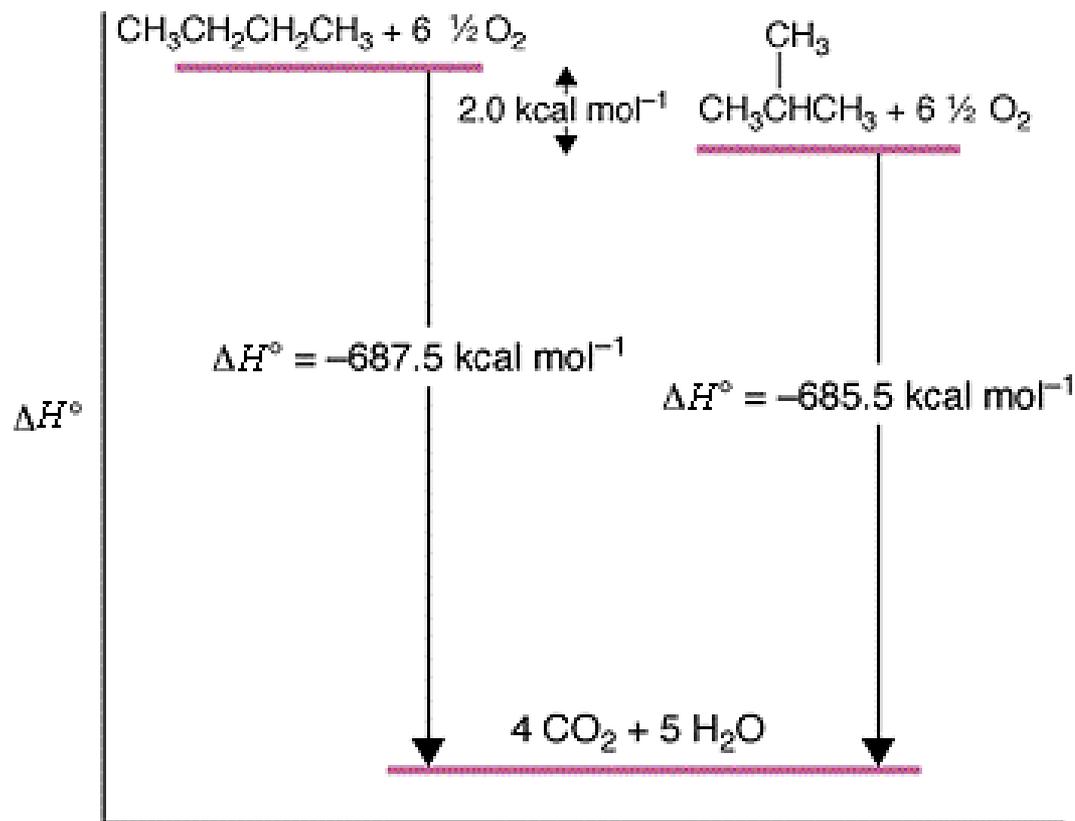
- É possível se medir a tensão angular de um anel medindo-se o calor de combustão deste, e comparando-se com o calor de combustão do seu respectivo hidrocarboneto acíclico.



**Isobutano: 2,2 kcal/mol mais estável do que o butano**

# Cicloalcanos: estruturas, estabilidades relativas, tensão angular e análise conformacional

Diagrama de energia ilustrando a diferença de energia de combustão do butano e do isobutano.



# Cicloalcanos: estruturas, estabilidades relativas, tensão angular e análise conformacional

- No caso dos ciclobutanos, a equação geral de combustão segue a seguinte regra:



Onde  $n$  é o número de carbonos que constituem o anel.

Ciclopropano  $\rightarrow n = 3$

Ciclobutano  $\rightarrow n = 4$

Ciclopentano  $\rightarrow n = 5$

Ciclohexano  $\rightarrow n = 6$

# Cicloalcanos: estruturas, estabilidades relativas, tensão angular e análise conformacional

A tabela a seguir indica os calores de combustão dos cicloalcanos

CYCLOALKANE (CH <sub>2</sub> ) <sub>n</sub>	n	HEAT OF COMBUSTION PER CH <sub>2</sub> GROUP			
		<u>HEAT OF COMBUSTION</u> (kcal mol <sup>-1</sup> )	(kJ mol <sup>-1</sup> )	(kcal mol <sup>-1</sup> )	(kJ mol <sup>-1</sup> )
Cyclopropane	3	499.8	2091	166.6	697.5
Cyclobutane	4	655.9	2744	164.0	686.2
Cyclopentane	5	793.5	3220	158.7	664.0
Cyclohexane	6	944.5	3952	<u>157.4</u>	658.6
Cycloheptane	7	1108.2	4636.7	158.3	662.3
Cyclooctane	8	1269.2	5310.3	158.6	663.6
Cyclononane	9	1429.5	5981.0	158.8	664.4
Cyclodecane	10	1586.0	6635.8	158.6	663.6
Cyclopentadecane	15	2362.5	9984.7	157.5	659.0
Unbranched alkane				<u>157.4</u>	658.6

Desta tabela, conclui-se:

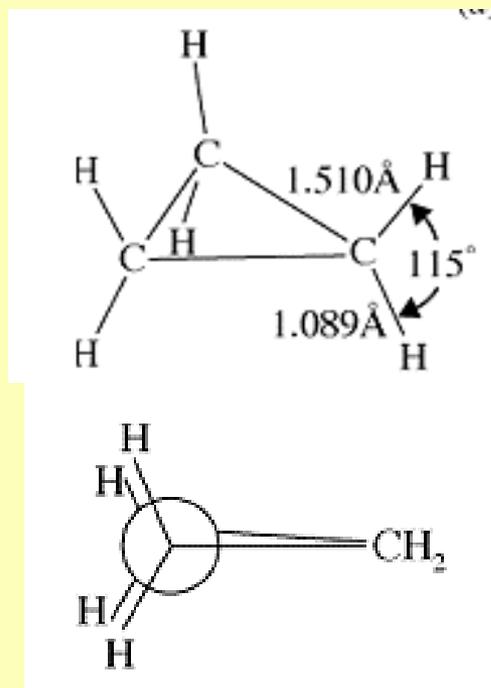
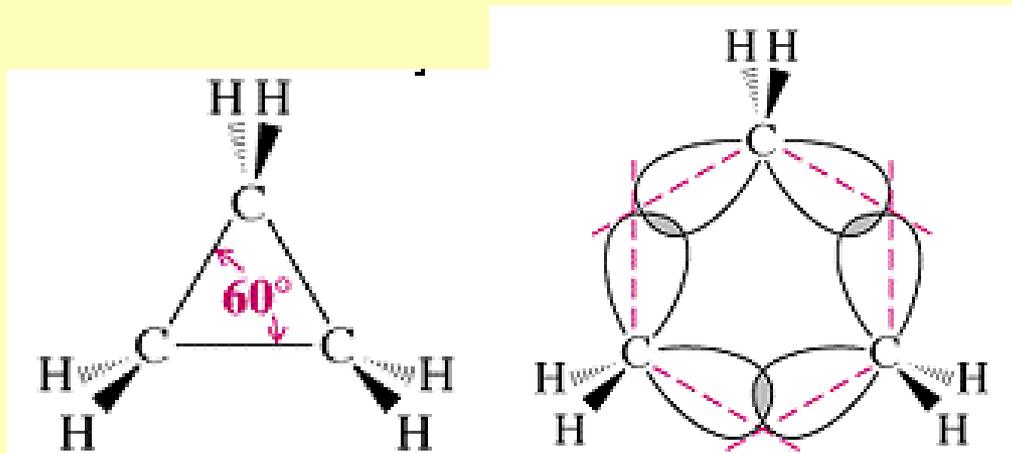
1. Que o ciclohexano, com  $\Delta H^\circ \text{CH}_2 = -157,4 \text{ kcal/mol}$  é o mais estável dentre os hidrocarbonetos cíclicos, e que não possui tensão angular, já que seu  $\Delta H^\circ$  é igual ao dos alcanos NÃO CÍCLICOS.
2. A tensão angular dos outros cicloalcanos pode ser medida multiplicando-se  $157,4 \text{ kcal/mol}$  x n (número de átomos de C do anel), e depois subtraindo-se o valor obtido do valor do calor de combustão do anel.

CYCLOALKANE	(kcal mol <sup>-1</sup> )	(kJ mol <sup>-1</sup> )
Cyclopropane	27.6	115
Cyclobutane	26.3	110
Cyclopentane	6.5	27
Cyclohexane	0	0
Cycloheptane	6.4	27
Cyclooctane	10.0	42
Cyclononane	12.9	54
Cyclodecane	12.0	50
Cyclopentadecane	1.5	6

**Desta tabela, conclui-se:**

- 1. O ciclopropano apresenta maior tensão angular (27,6 kcal/mol).**
- 2. Em seguida, o ciclobutano (26,3 kcal/mol).**

**Tais dados indicam que os orbitais  $sp^3$  dos carbonos destes anéis apresentam uma sobreposição incompleta quando da formação das ligações C-C  $\sigma$  (sigma).**



# Tensão angular em cicloalcanos



"planar" cyclopentane  
bond angles =  $108^\circ$



"planar" cyclohexane  
bond angles =  $120^\circ$



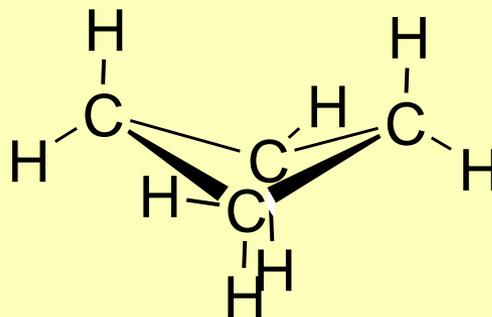
"planar" cycloheptane  
bond angles =  $128.6^\circ$

- **Tensão angular** se origina do desvio dos ângulos internos do cicloalcano do “ângulo ideal  $sp^3$ ”  $109.5^\circ$
- **Tensão torsional** resulta da repulsão entre os elétrons das ligações C-H eclipsadas.
- **Tensão estérica** (ou impedimento estérico) resulta da proximidade entre átomos ou grupos de átomos que tendem a se repelir.

# Tensão angular em cicloalcanos

**Ciclobutano também apresenta tensão angular, mas menor que o ciclopropano**

**A “estrutura real” do ciclobutano é um “formato borboleta”**

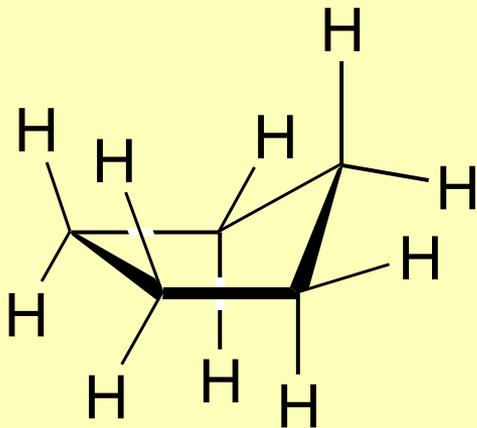


**Esta conformação evita a “forma eclipsada” entre hidrogênios vizinhos**

# Tensão angular em cicloalcanos

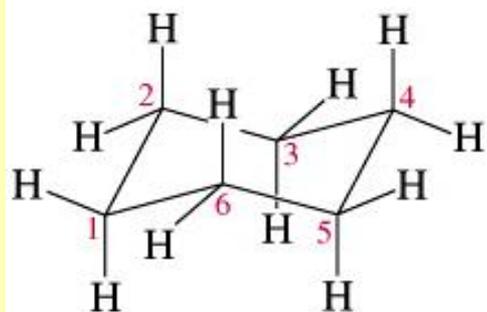
O ciclopentano praticamente não apresenta tensão angular

De maneira a diminuir ao máximo a tensão torsional devido à sobreposição de ligações C-H, o ciclopentano adota uma “conformação envelope”

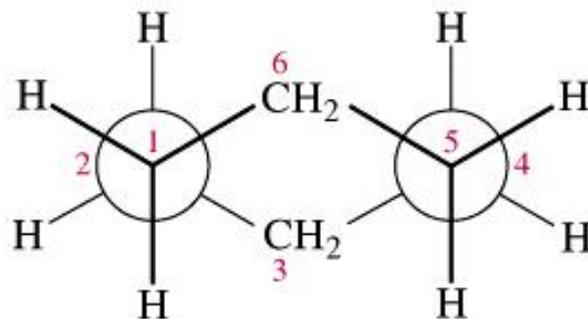


Um dos grupos  $\text{CH}_2$  fica fora do plano

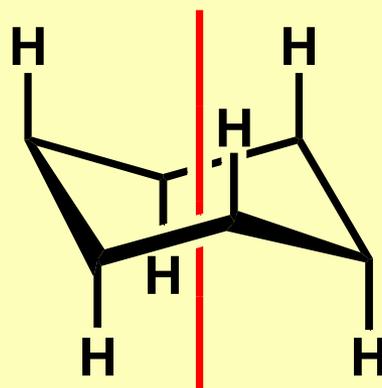
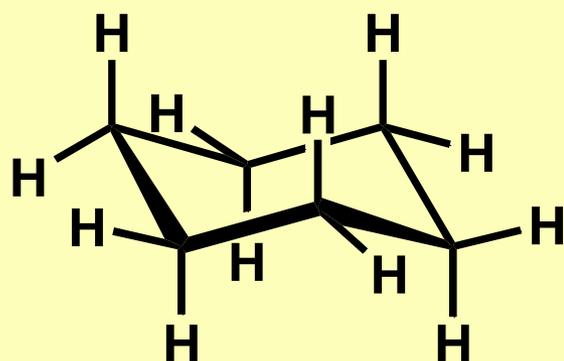
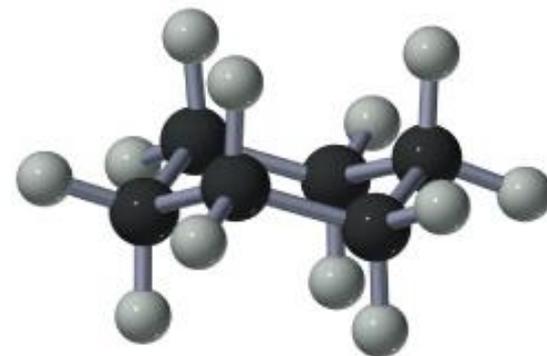
# Análise conformacional do ciclohexano



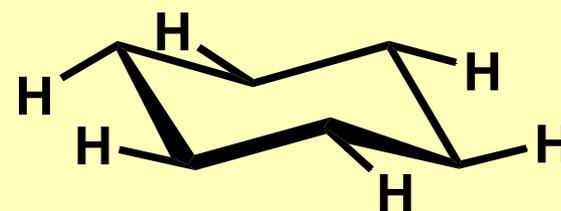
Conformação “cadeira”  
do ciclohexano



Projeção de Newman da  
conformação “cadeira”

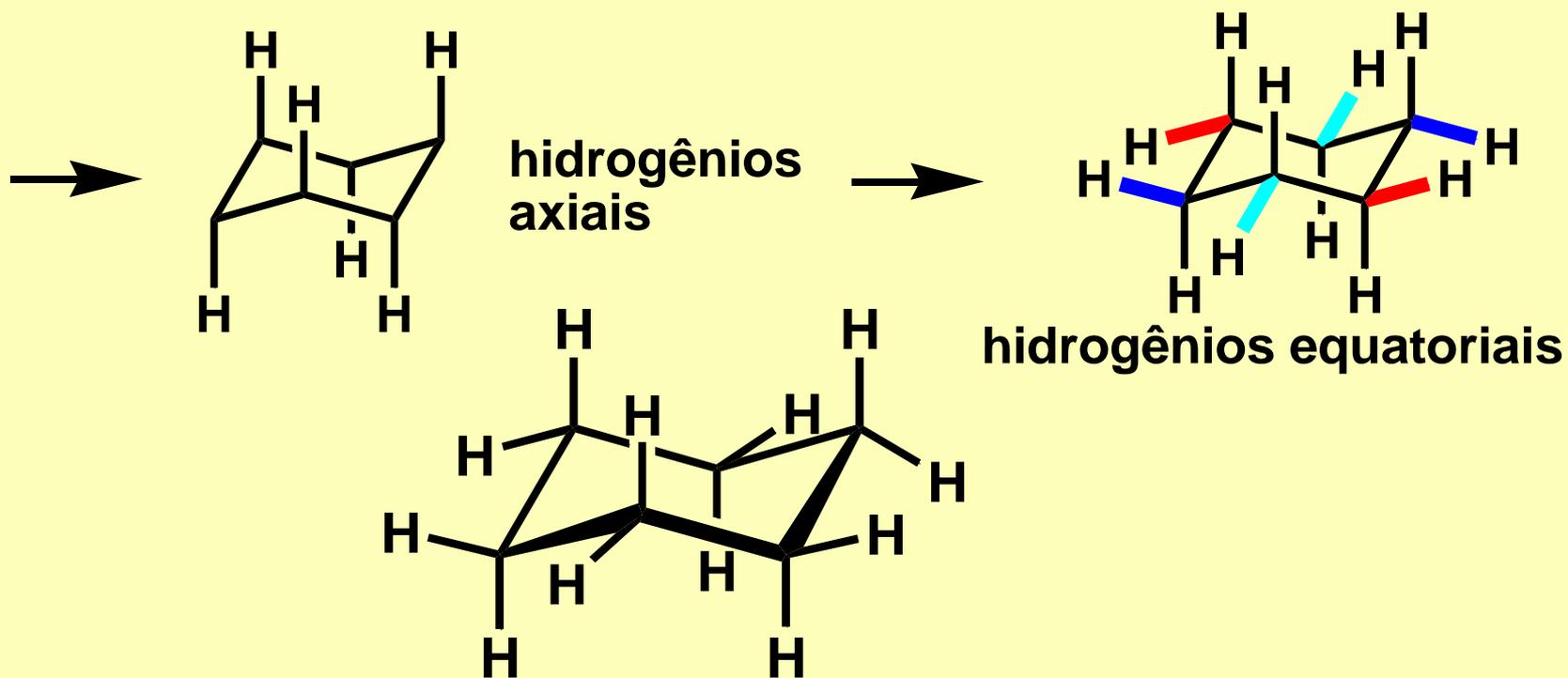
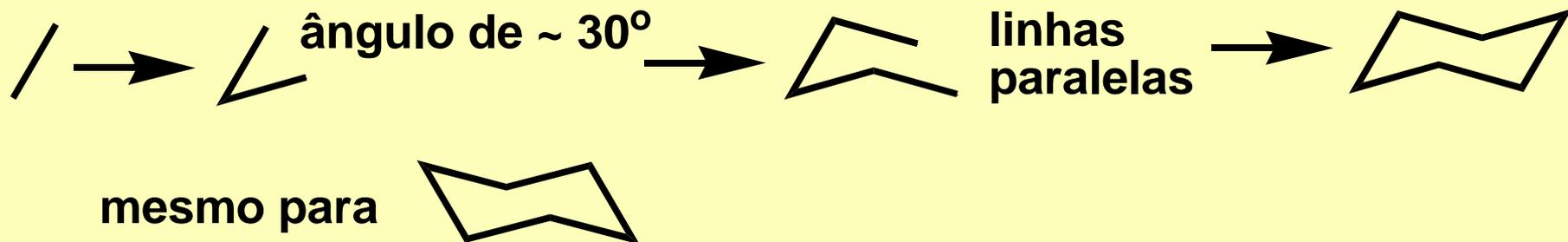


hidrogênios  
axiais



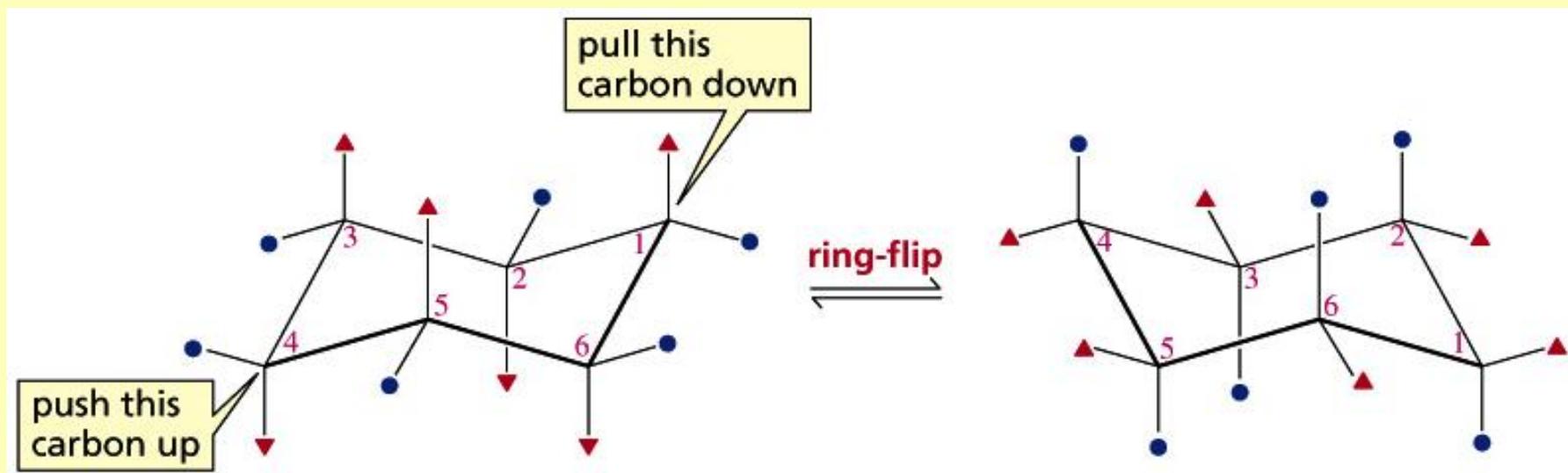
hidrogênios  
equatoriais

# Desenhando o ciclohexano na conformação cadeira



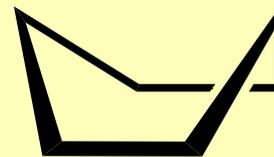
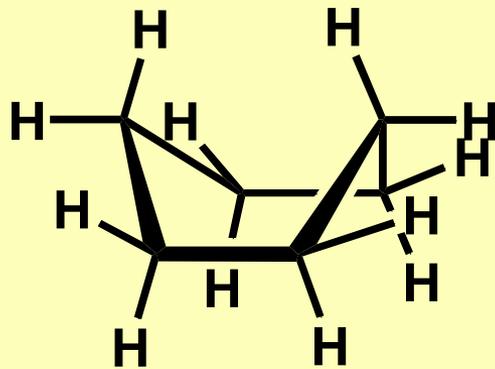
# Interconversão entre as formas cadeira do ciclohexano

- Como resultado da rotação entre as ligações C-C do ciclohexano, este apresenta **INTERCONVERSÃO MUITO RÁPIDA À TEMPERATURA AMBIENTE** entre as duas formas cadeira.
- Neste processo, os hidrogênios axiais de uma forma se tornam equatoriais na outra, e vice-versa.

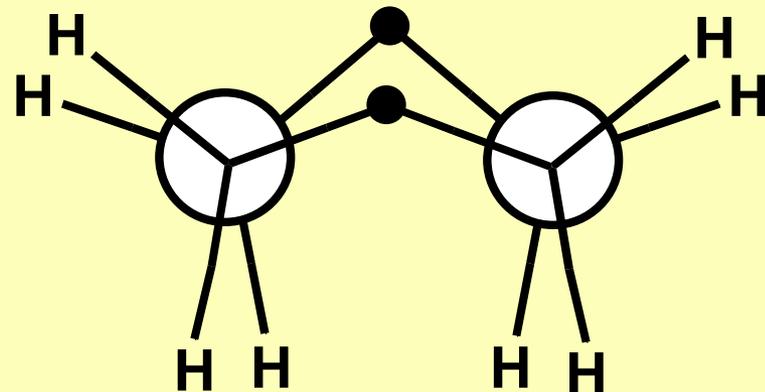


# Conformação “barco” do ciclohexano

- Existe outra conformação do ciclohexano - a **conformação barco** – que ocorre entre as duas conformações cadeira durante o processo de interconversão.

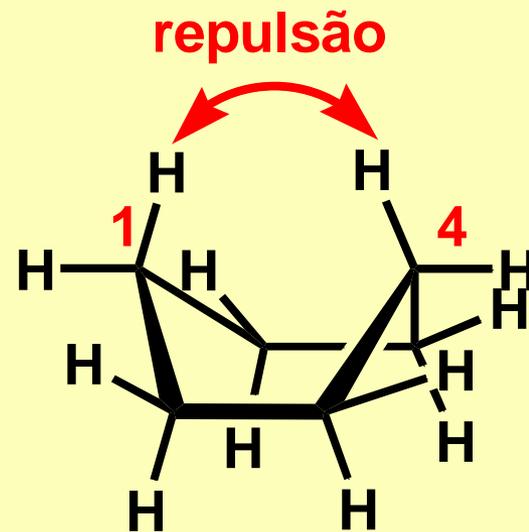
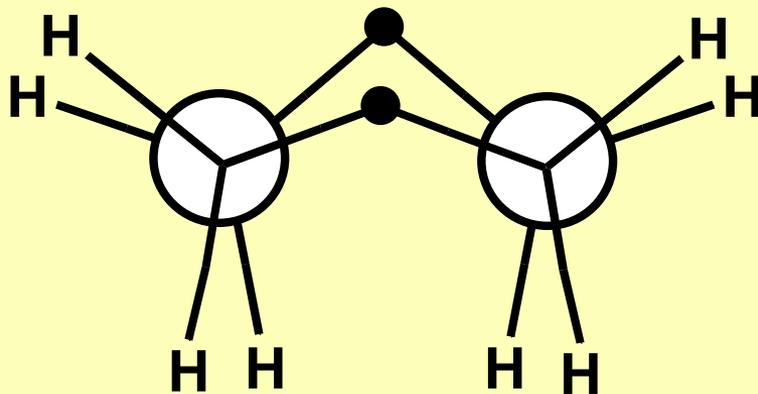


**Projeção de Newman  
da conformação barco  
do ciclohexano**



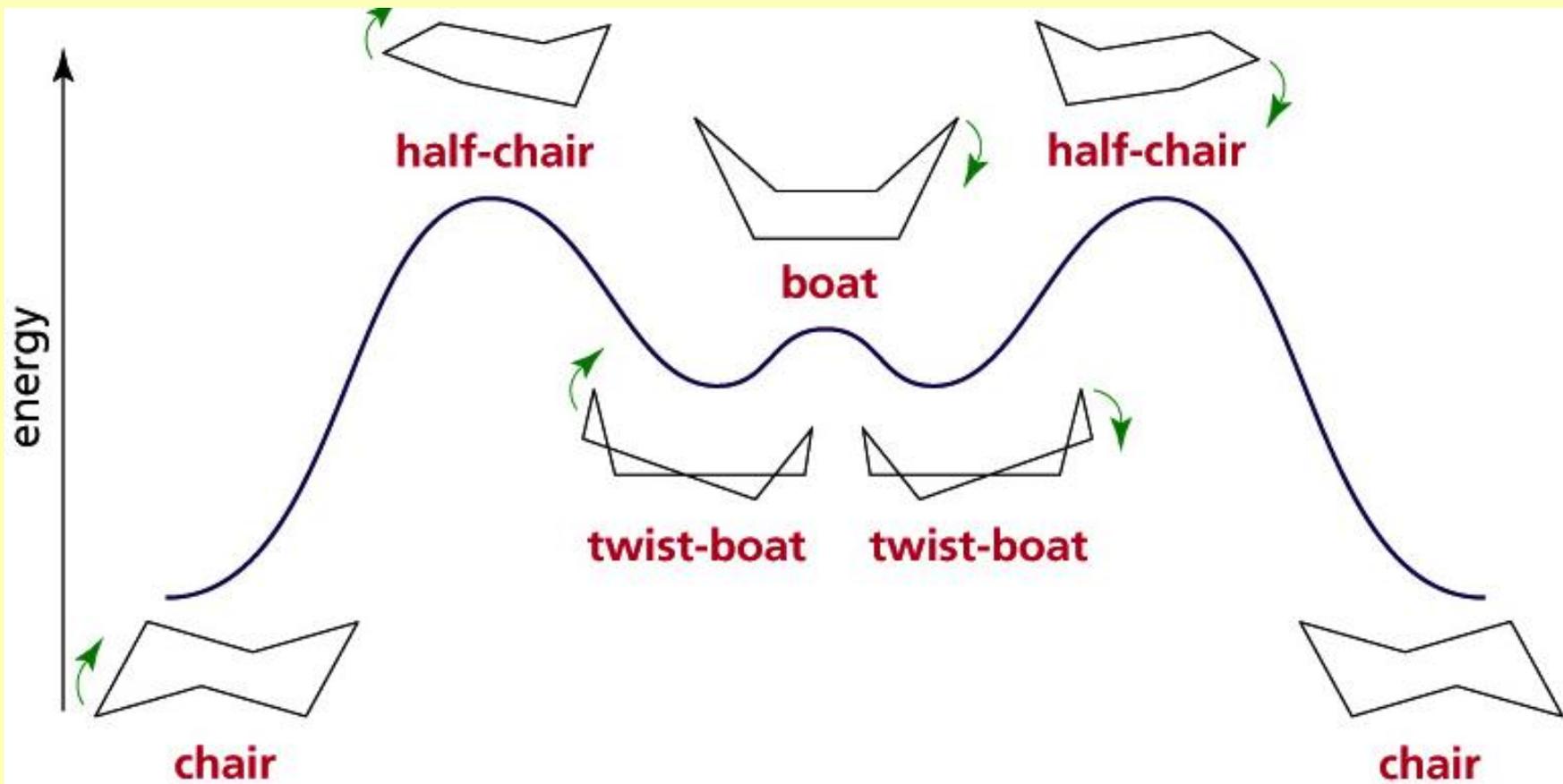
# Conformação “barco” do ciclohexano

- A conformação “barco” do ciclohexano é menos estável do que a conformação cadeira, pois:
  1. Os hidrogênios estão em posição eclipsada.
  2. Os hidrogênios nas posições relativas 1 e 4 estão muito próximos entre si e apresentam repulsão devido a forças de Van der Waals.



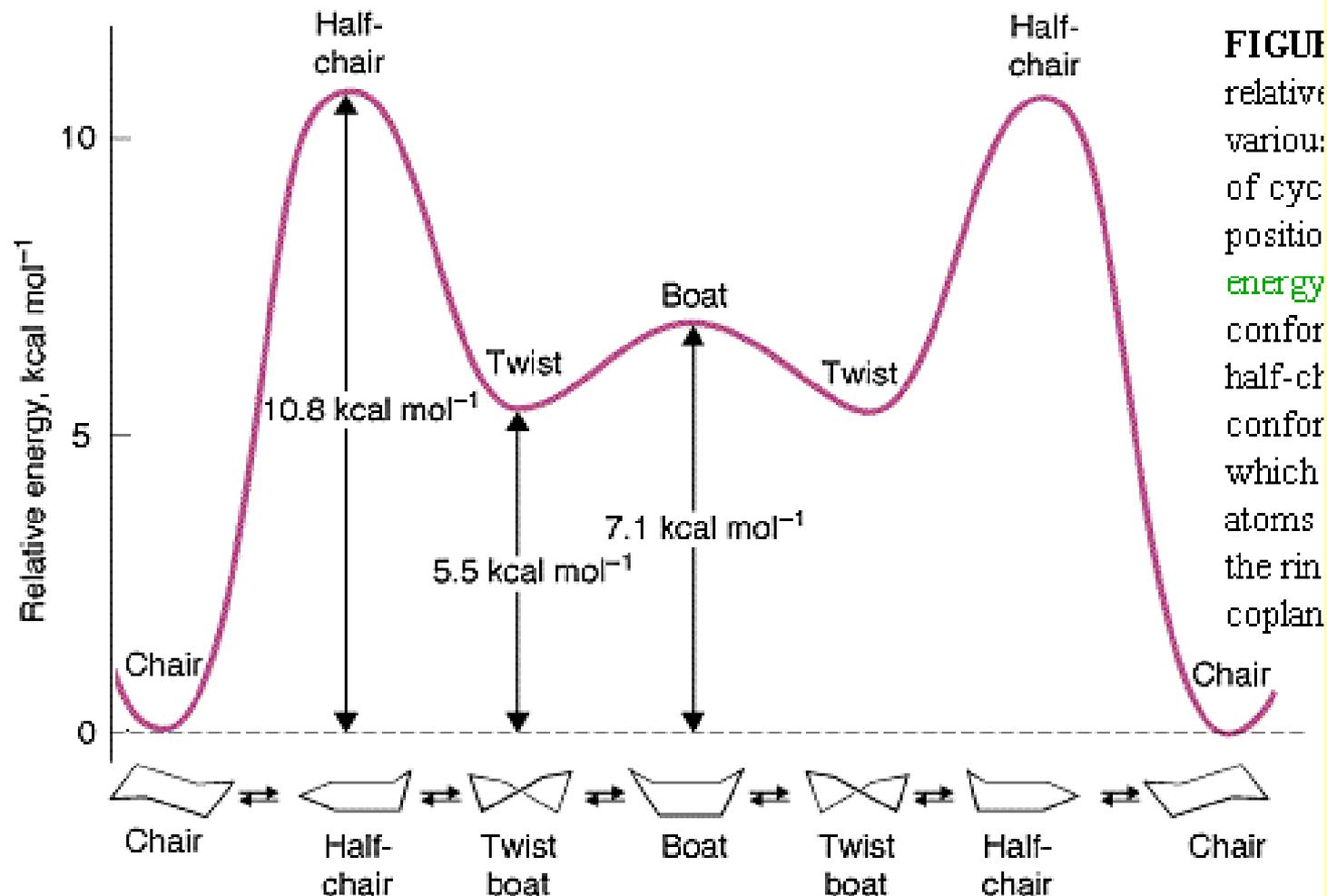
# Interconversão de conformações do ciclohexano

- Durante a interconversão cadeira → bote → cadeira, o ciclohexano adota momentaneamente uma conformação designada “bote torcido”.



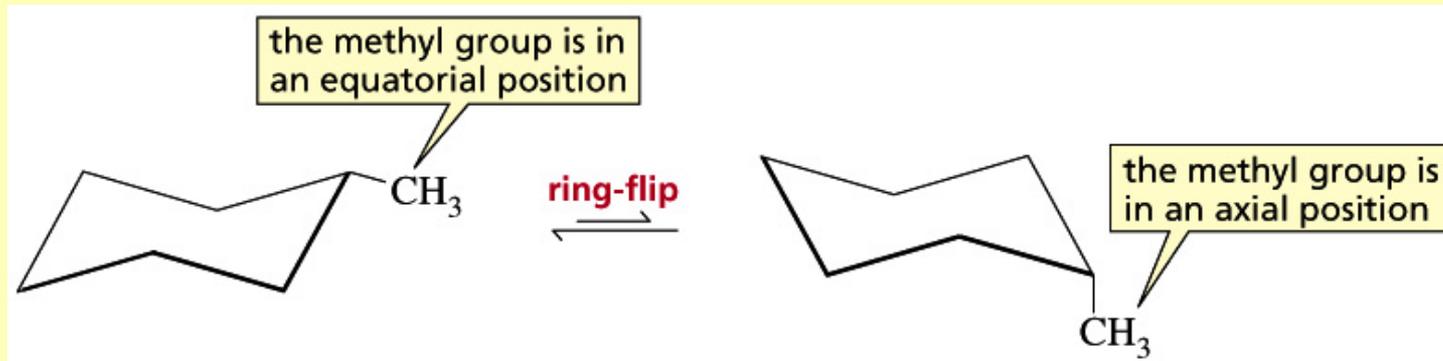
# Interconversão de conformações do ciclohexano

- A conformação cadeira é a mais estável.

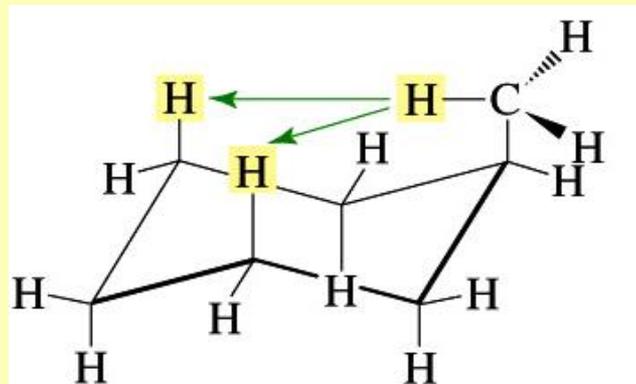


# Análise conformacional de ciclohexanos com 1 substituínte

Quando o ciclohexano apresenta 1 substituínte, as duas conformações cadeira não são mais equivalentes.



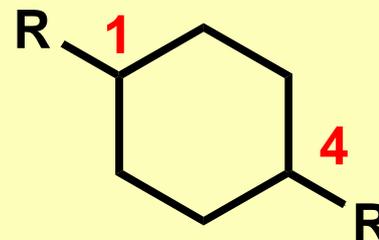
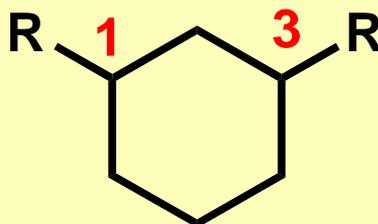
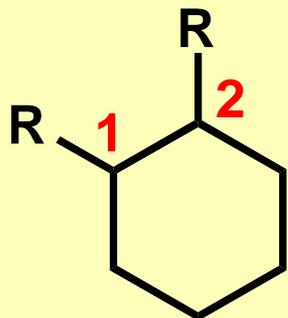
Neste caso, a conformação com o substituínte em posição axial é menos estável devido às interações com os outros hidrogênios em posição axial, através de forças de repulsão de Van der Waals.



Também chamadas interações 1,3-diaxiais, ou interações estéricas

# Conformações de ciclohexanos dissustituídos

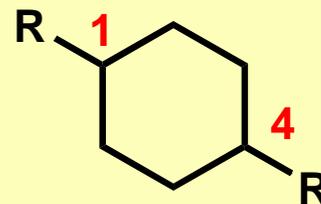
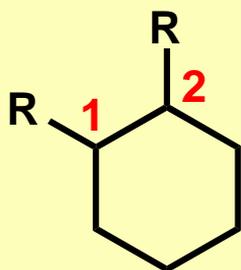
- Podem existir 3 ciclohexanos dissustituídos, em posição 1,2, em posição 1,3 e em posição 1,4.



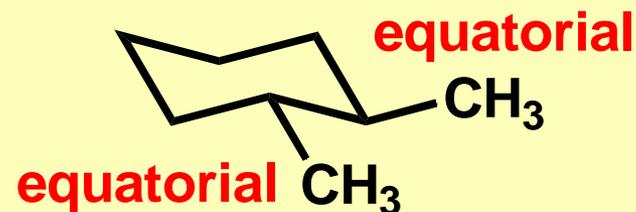
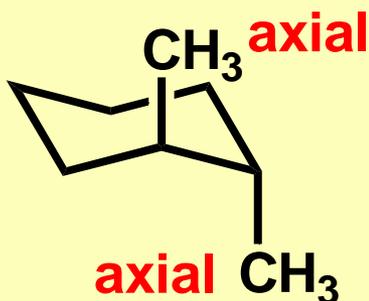
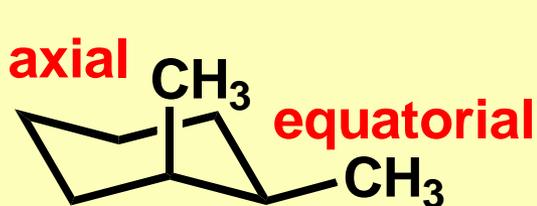
Neste caso, é necessário se estabelecer as posições relativas entre os substituintes.

# Conformações de ciclohexanos dissustituídos

- Podem existir 3 ciclohexanos dissustituídos, em posição 1,2, em posição 1,3 e em posição 1,4.

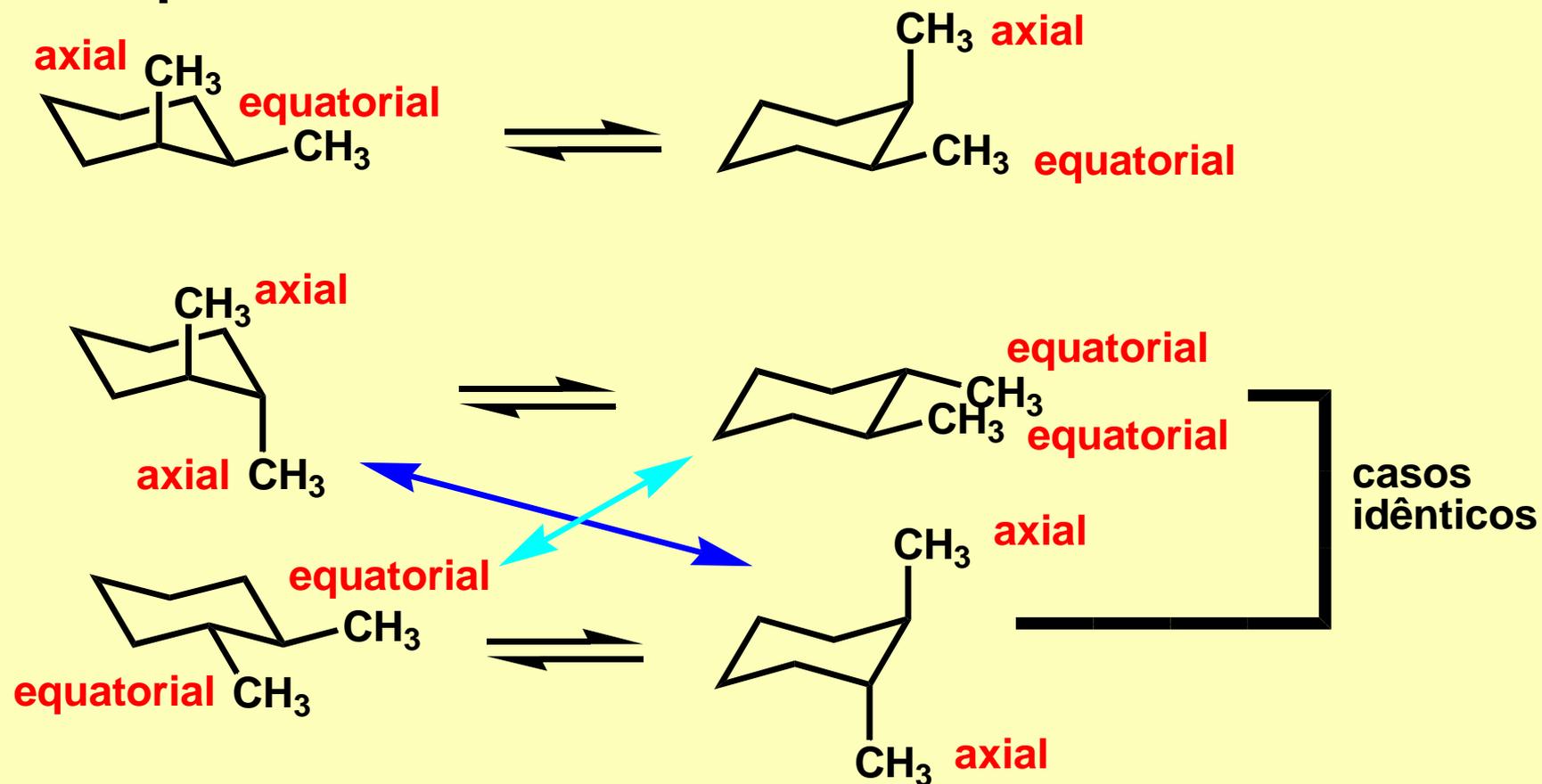


- Neste caso, é necessário se estabelecer as posições relativas entre os substituintes.



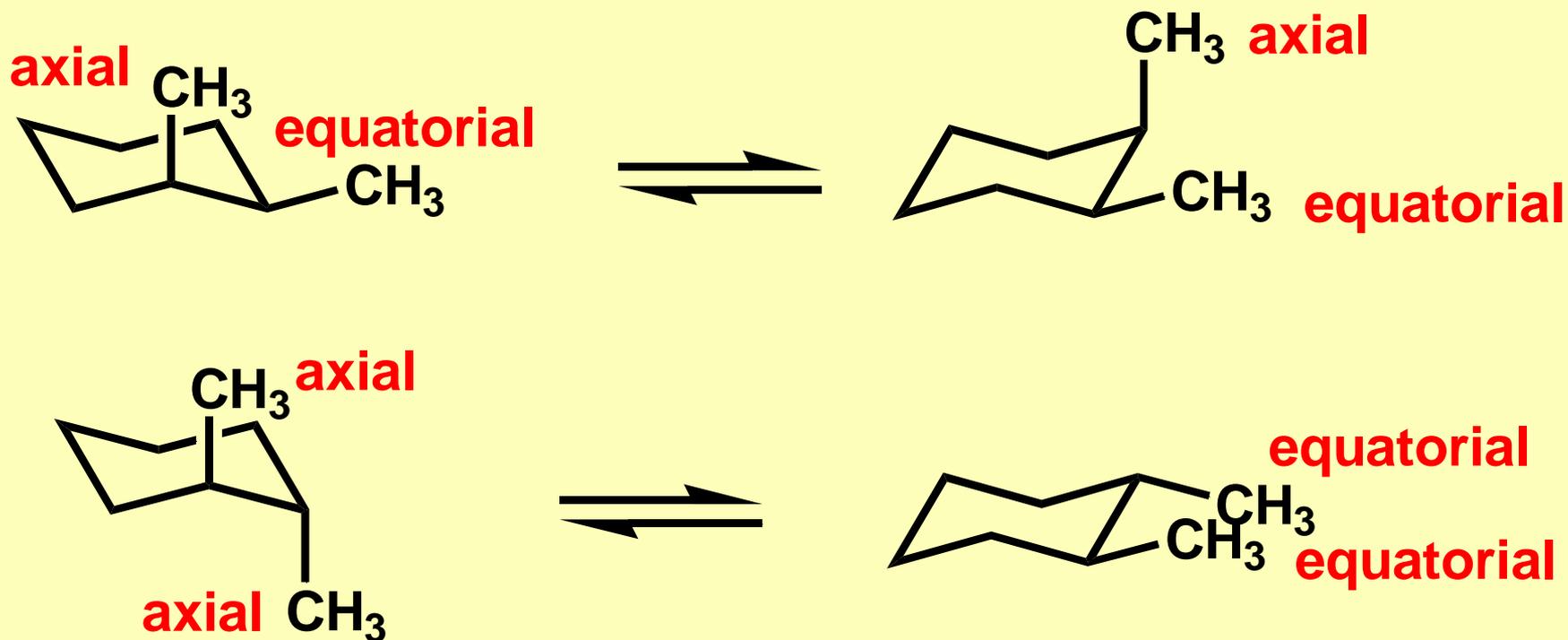
# Conformações de ciclohexanos dissustituídos

- Quando ocorre a interconversão entre as conformações, o grupo  $\text{CH}_3$  que era axial se torna equatorial e vice-versa.

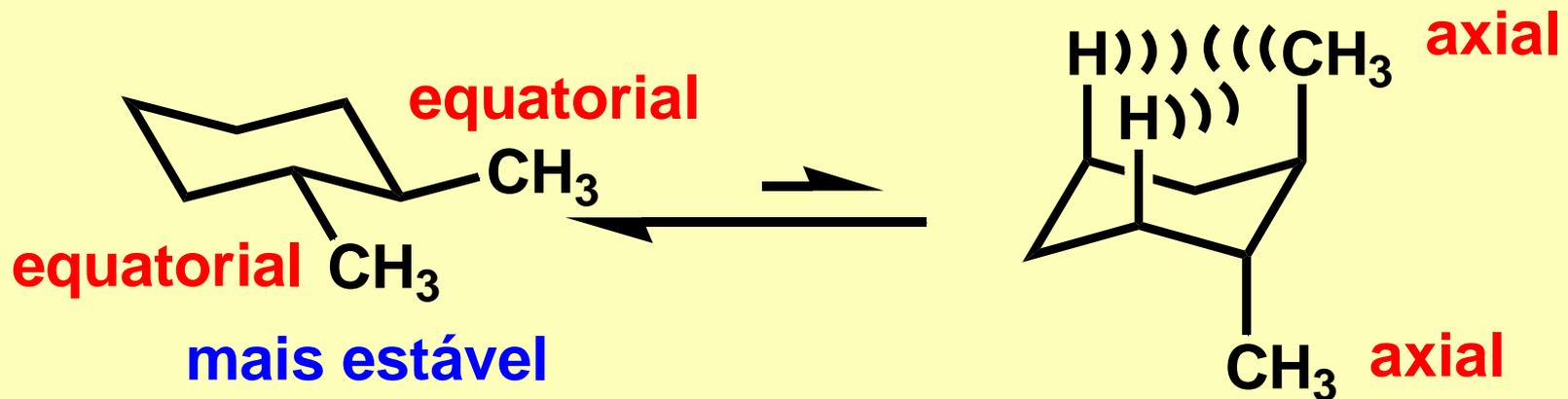


# Conformações de ciclohexanos dissubstituídos

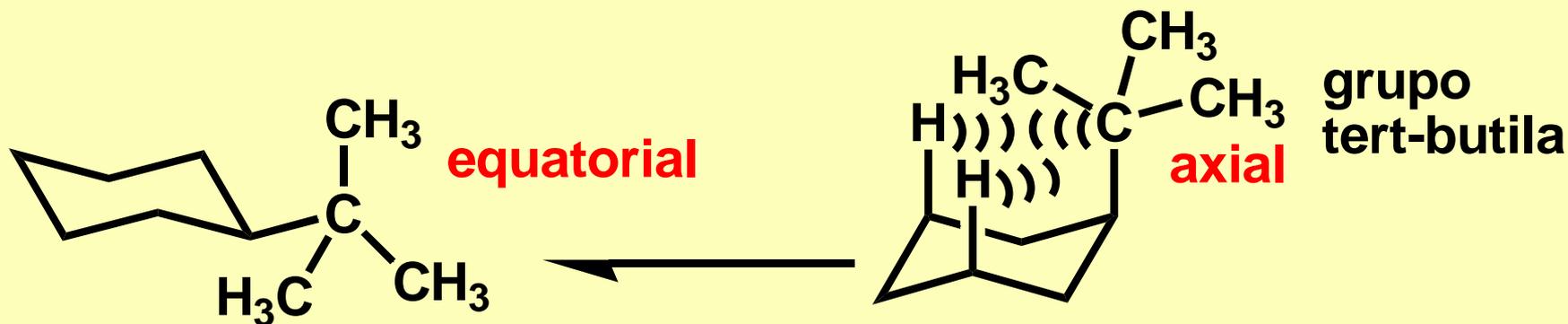
- Logo, só temos 2 casos:
  1. Equatorial, axial, e;
  2. Equatorial, equatorial com axial, axial



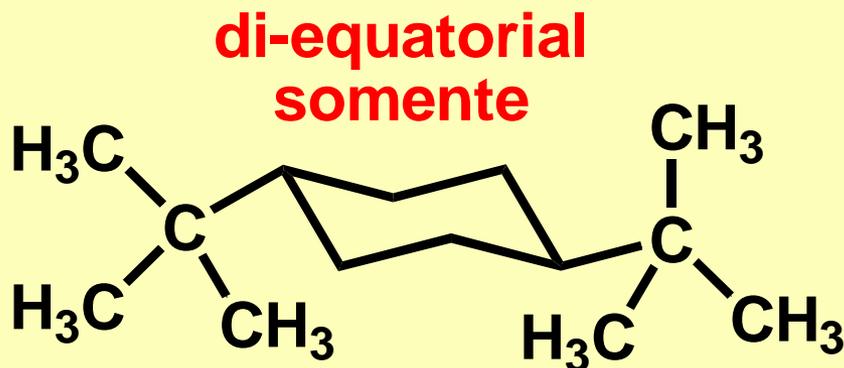
- Pelo fato dos substituintes em posição equatorial apresentarem um grau muito menor de interações espaciais com forças de Van der Waals, **as conformações com os substituintes em posição equatorial são sempre as termodinamicamente mais estáveis.**



- Este fato é particularmente verdadeiro se os substituintes forem muito volumosos



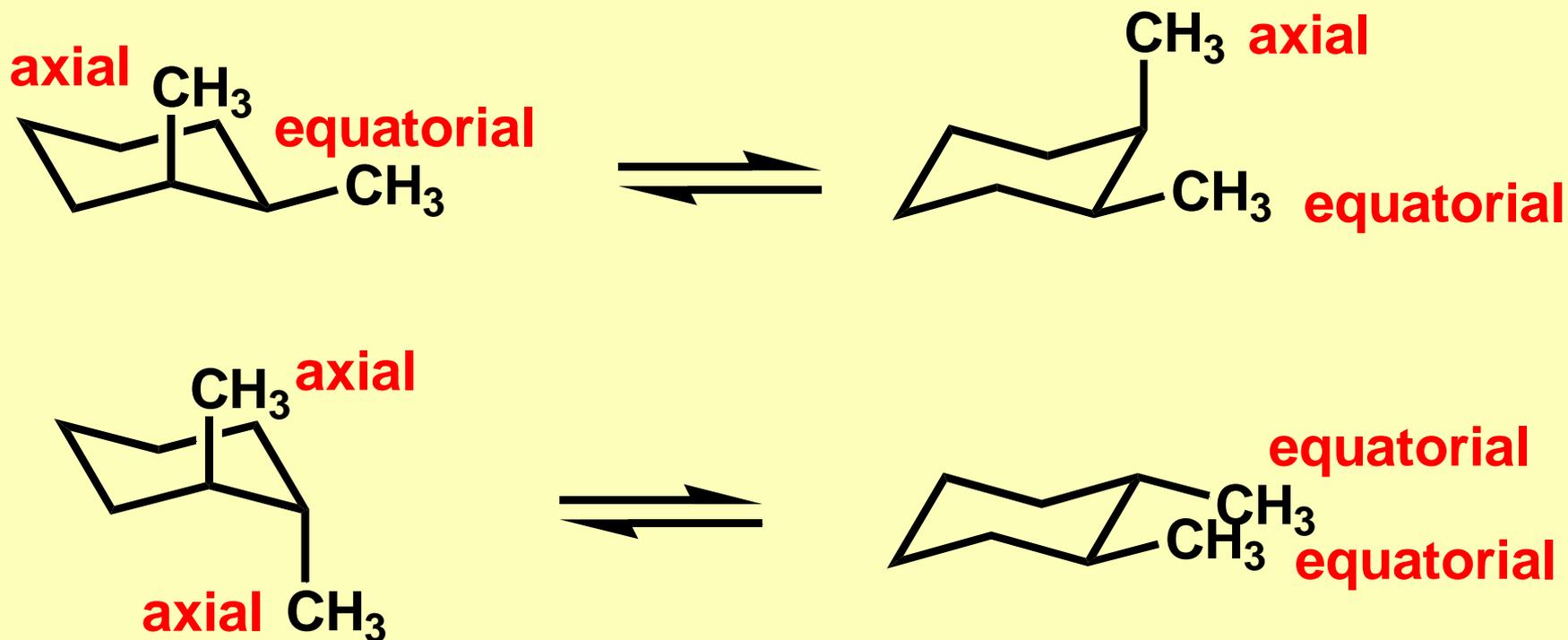
mais estável  
única conformação observada



# Isômeros de ciclohexanos dissustituídos

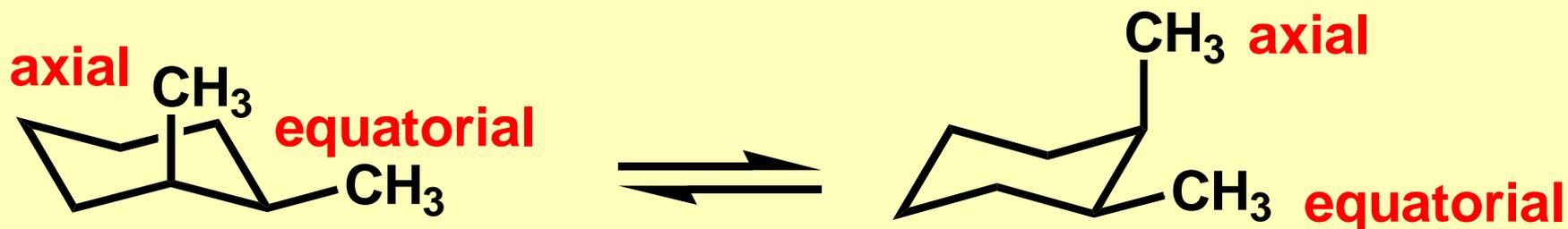
Só são possíveis dois isômeros do ciclohexano:

1. Equatorial-axial (e vice versa)
2. Equatorial-equatorial (axial axial)



# Isômeros de ciclohexanos dissustituídos

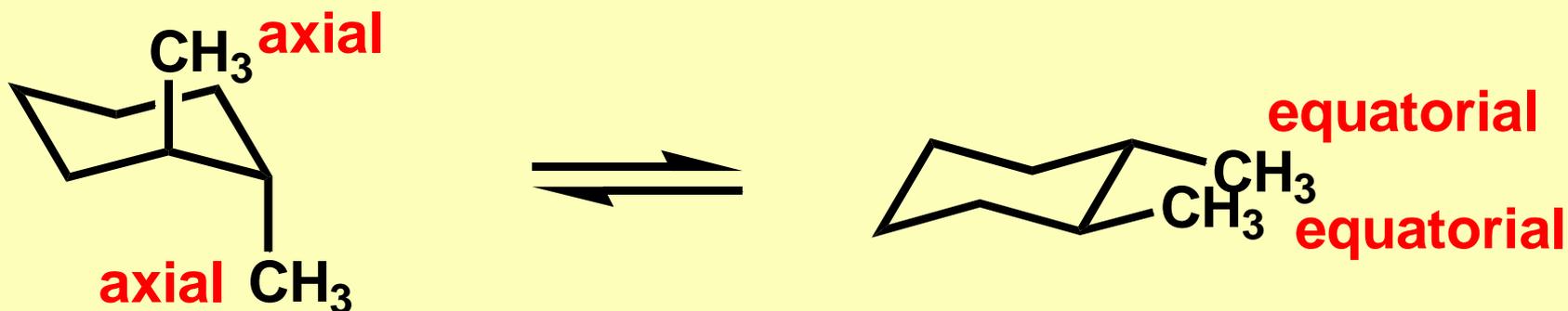
No caso do ciclohexano com substituintes axial-equatorial (e vice versa), os dois substituintes situam-se sempre do mesmo lado do anel → cis-dissustituídos



**cis-1,2-dimetilciclohexano**

# Isômeros de ciclohexanos dissustituídos

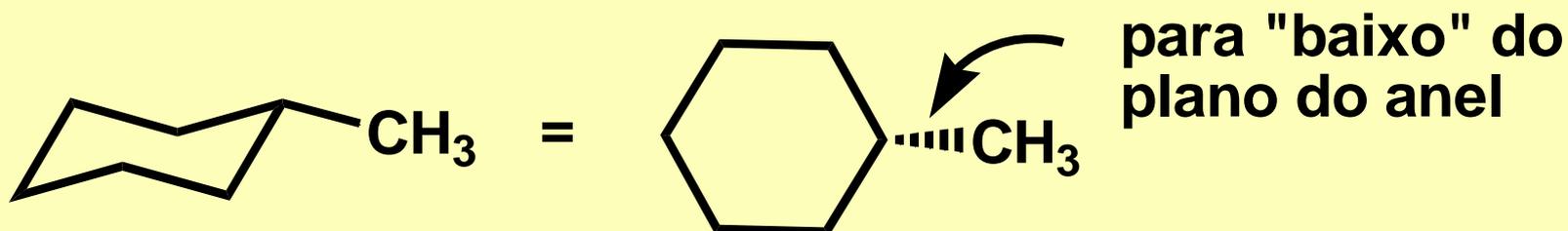
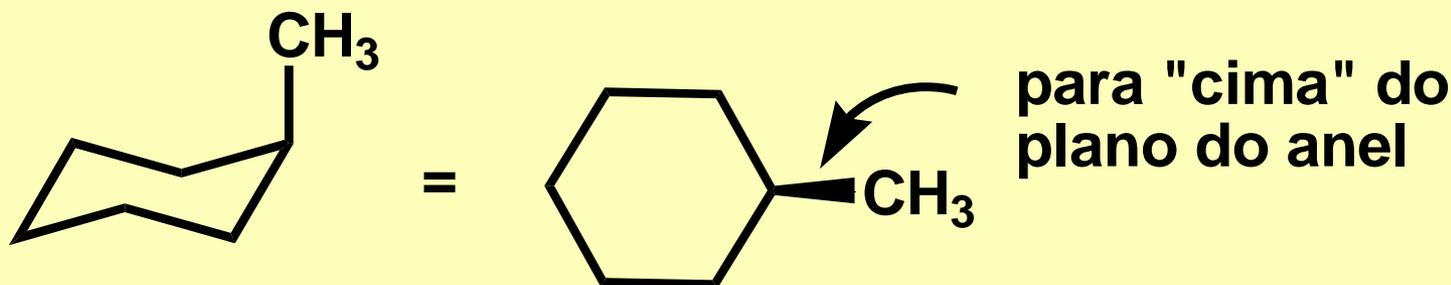
No caso do ciclohexano com substituíntes axial-axial (equatorial), os dois substituíntes situam-se em lados opostos do anel → trans-dissustituídos



trans-1,2-dimetilciclohexano

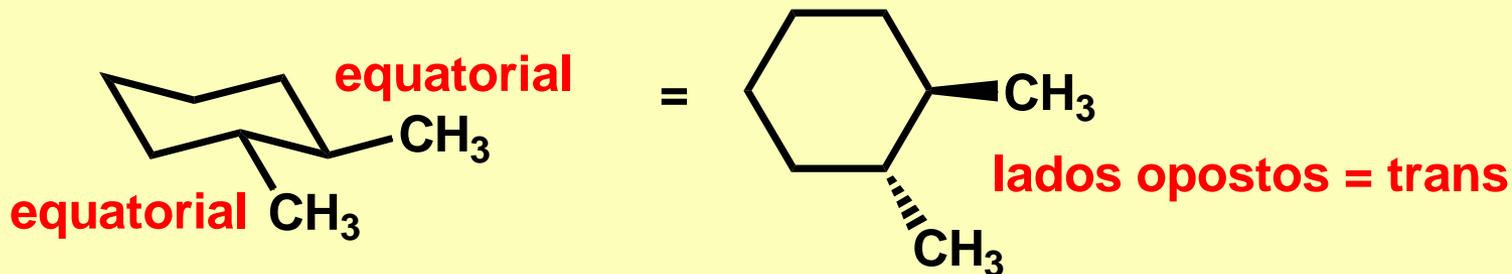
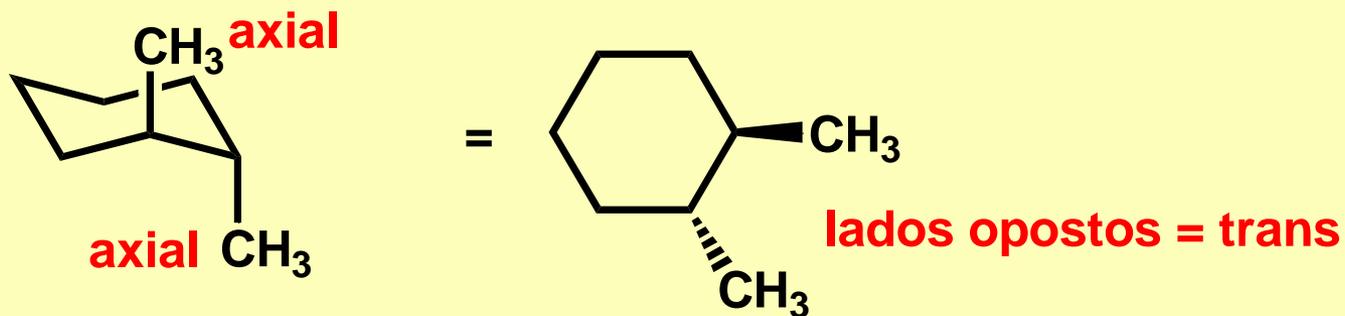
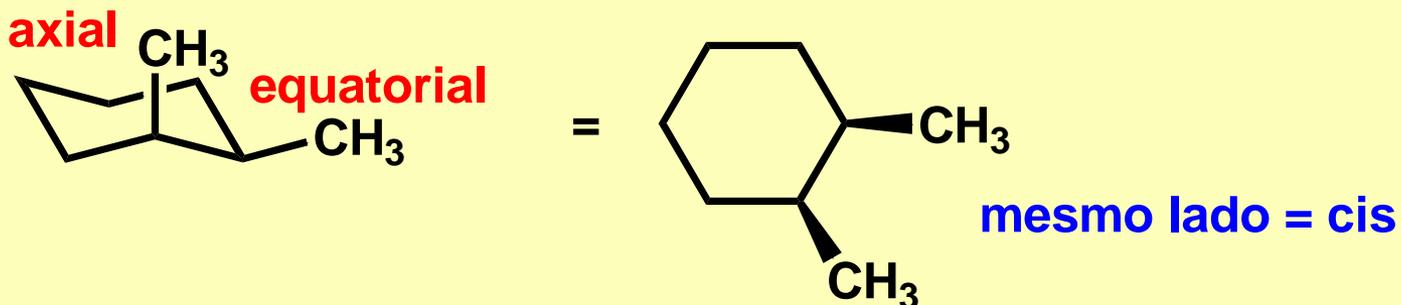
# Isômeros de ciclohexanos dissustituídos

Ambos casos podem ser representados em estruturas planares.



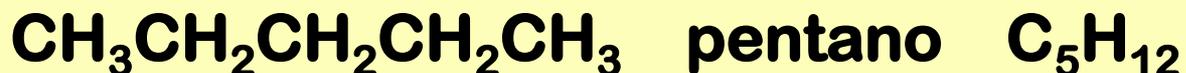
# Isômeros de ciclohexanos dissubstituídos

Logo...



# Alcenos: estrutura, nomenclatura e propriedades químicas e físicas

- Enquanto que a fórmula geral dos alcanos é  $C_nH_{2n+2}$



as estruturas dos **alcenos apresentam pelo menos uma dupla ligação C=C.**



e por isso os alcenos acíclicos que apresentam uma única dupla ligação têm fórmula geral

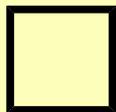


# Alcenos: estrutura, nomenclatura e propriedades químicas e físicas

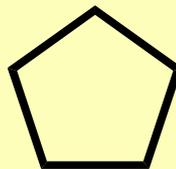
- Note que os **alcanos cíclicos** também **apresentam a mesma fórmula geral dos alcenos acíclicos com uma única dupla ligação**, e por isso **alcanos cíclicos são isômeros estruturais de alcenos acíclicos com uma única dupla ligação**.



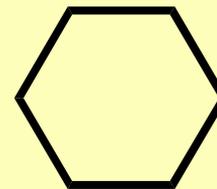
ciclopropano  
 $C_3H_6$



ciclobutano  
 $C_4H_8$



ciclopentano  
 $C_5H_{10}$

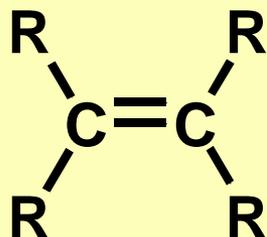


ciclohexano  
 $C_6H_{12}$



# Alcenos: estrutura, nomenclatura e propriedades químicas e físicas

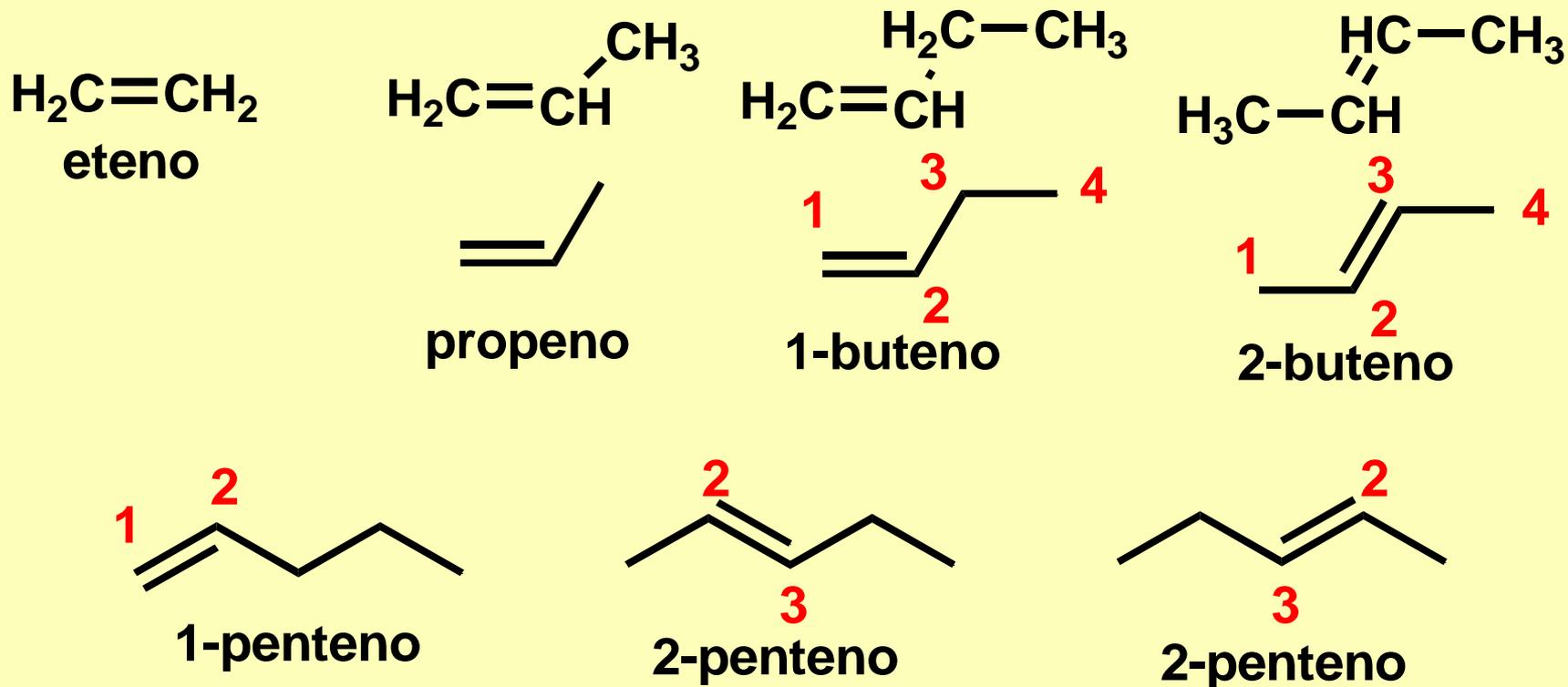
- **Alcanos e cicloalcanos** são denominados **hidrocarbonetos saturados**, pois não apresentam ligações duplas, i. e. não apresentam deficiência de hidrogênios.
- **Alcenos e alcinos** (mais adiante) são chamados de **hidrocarbonetos insaturados** pois apresentam duplas e triplas ligações, ou seja, **ligações deficientes de hidrogênios** (não saturadas).



R = grupos alquila, derivados do benzeno, halogênios.

# Alcenos: nomenclatura

- Similar à dos alcanos → sufixo “eno”
- Importante: especificar a posição da dupla ligação



# Alcenos: nomenclatura



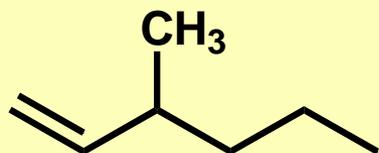
1-hexeno



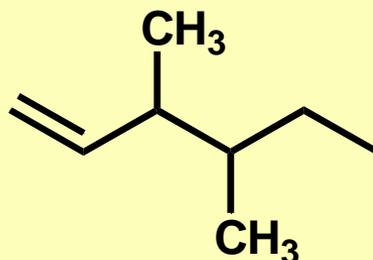
2-hexeno



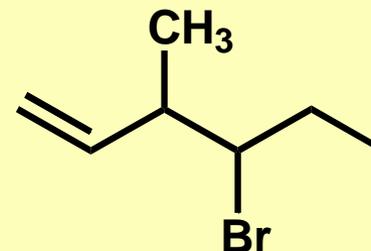
3-hexeno



3-metil-1-hexeno



3,4-dimetil-1-hexeno



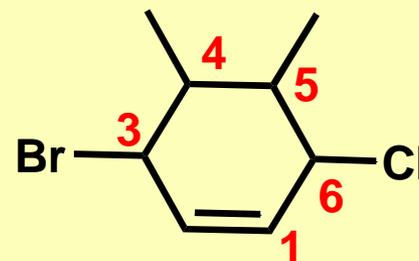
4-bromo-3-metil-1-hexeno



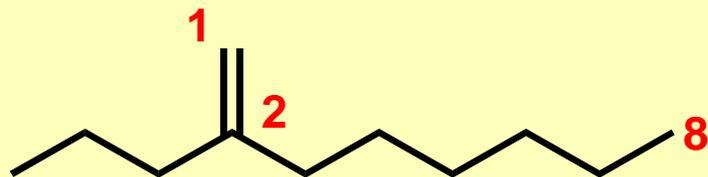
ciclohexeno



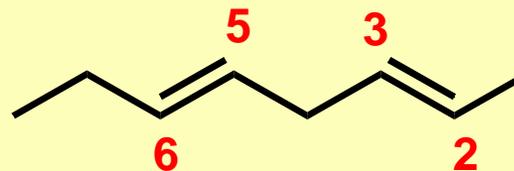
4-metilciclohexeno



3-bromo-6-cloro-4,5-dimetilciclohexeno



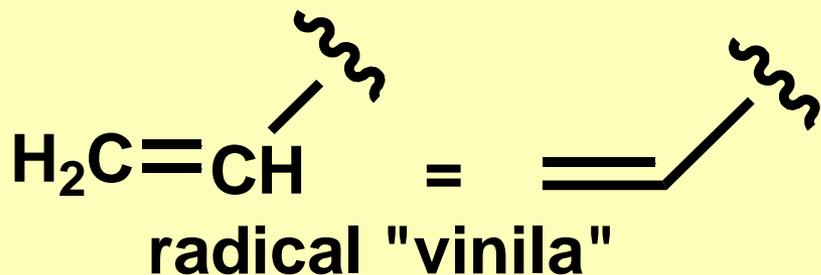
2-propil-1-octeno



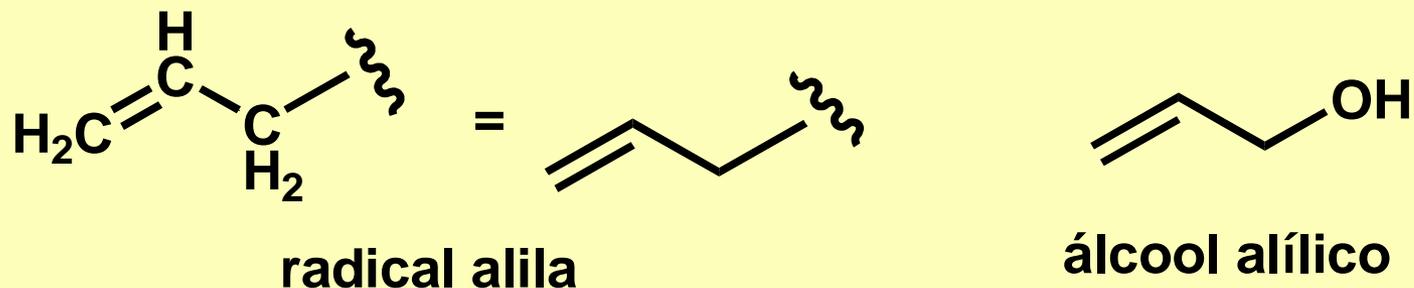
2,5-octadieno

# Alcenos: nomenclatura

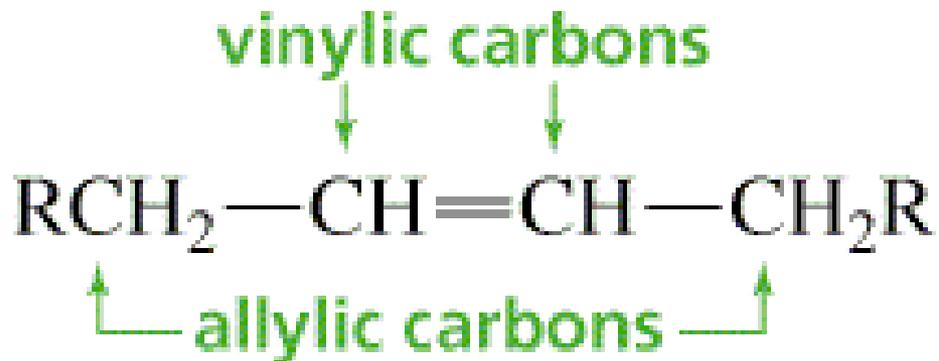
- Considerar sempre a cadeia mais longa contendo a(s) dupla(s) ligação (ões).
- Importante: especificar a posição da dupla ligação, sempre com o menor número possível.
- Numerar os substituintes com a menor numeração possível, por ordem alfabética (IUPAC)
- Em anéis com só 1 dupla, não é necessário especificar a posição da dupla ligação → será sempre o carbono 1.
- Radicais contendo duplas ligações:



# Alcenos: nomenclatura



- Os carbonos da dupla ligação são chamados de carbonos vinílicos, enquanto que os carbonos adjacentes aos da dupla ligação são chamados de alílicos.

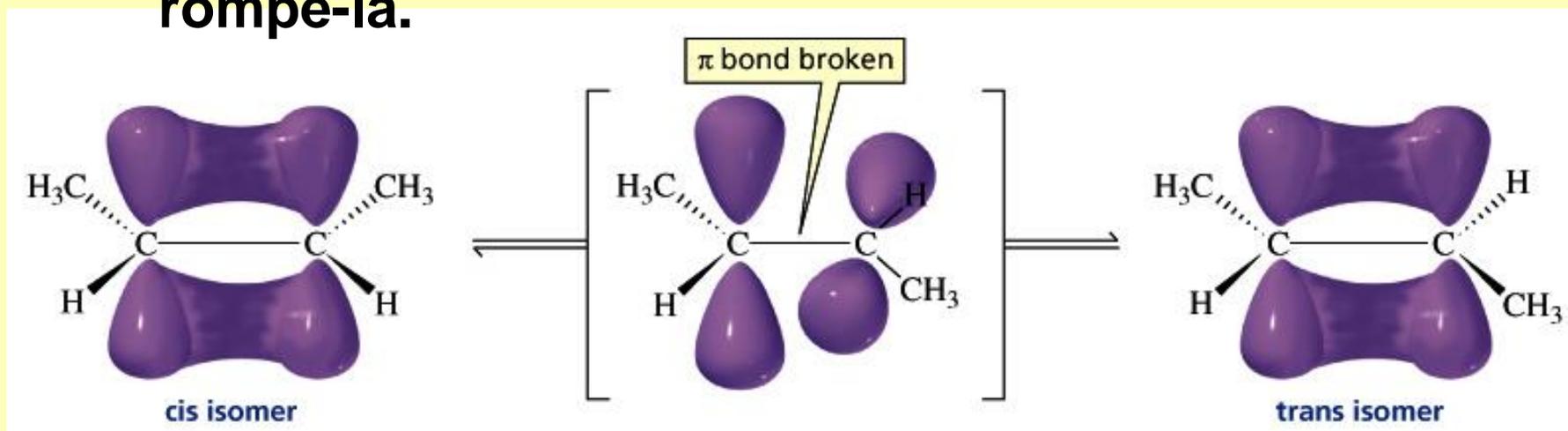


# Estrutura dos alcenos

- Dupla ligação
  - 1 ligação  $\sigma$  formada por orbitais  $sp^2$
  - 1 ligação  $\pi$  formada por orbitais p puros.

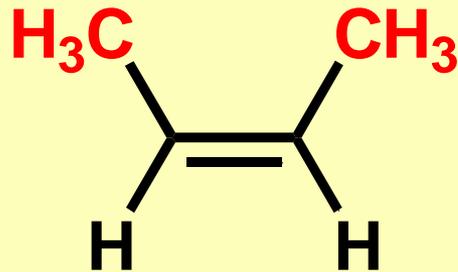
A **dupla ligação não permite rotação livre.**

É uma ligação rígida. Para mudar de posição os substituintes dos carbonos da dupla, é preciso rompê-la.

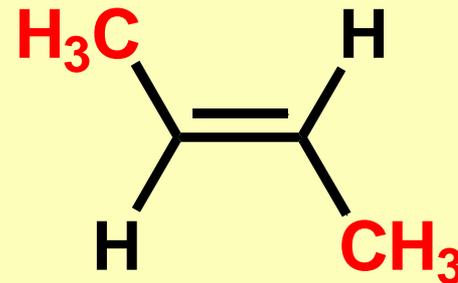


# Isomeria geométrica das duplas ligações

- São possíveis 2 isômeros de duplas ligações substituídas com pelo menos 1 substituínte em cada 1 dos carbonos da dupla ligação.



cis-2-buteno



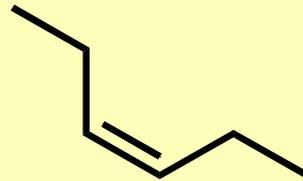
trans-2-buteno

Assim, **para duplas ligações substituídas por radicais iguais em cada um dos carbonos das duplas**, chamamos isômero **cis** para a dupla que possui os radicais do mesmo lado, e **trans** à dupla com radicais em lados opostos.

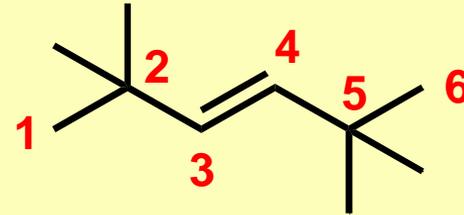
# Isomeria geométrica das duplas ligações



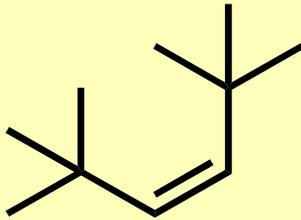
trans-3-hexeno



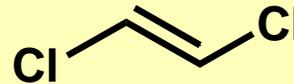
cis-3-hexeno



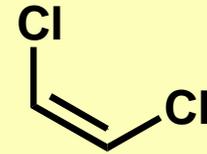
trans-2,2,5,5-tetrametilhex-3-eno



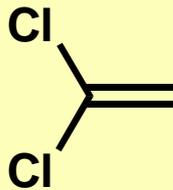
cis-2,2,5,5-tetrametilhex-3-eno



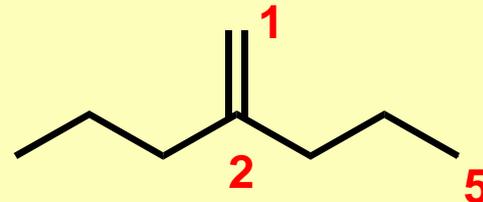
trans-1,2-dicloroeteno



cis-1,2-dicloroeteno



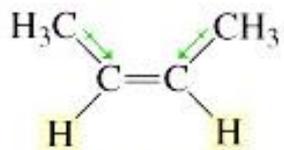
1,1-dicloroeteno  
não apresenta  
isomeria geométrica



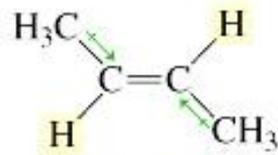
2-propil-1-penteno  
não apresenta  
isomeria geométrica

# Isomeria geométrica das duplas ligações

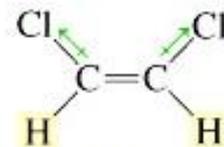
- Como duplas ligações não sofrem rotação, os isômeros não sofrem interconversão através de equilíbrio químico
- Podem ser separados um do outro.
- Apresentam propriedades físicas e químicas diferentes (pKa, ponto de fusão, ponto de ebulição, momento dipolar, índice de refração, etc.)



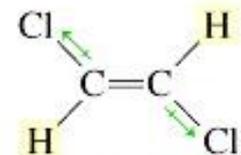
*cis*-2-butene  
bp = 3.7 °C  
 $\mu = 0.33$  D



*trans*-2-butene  
bp = 0.9 °C  
 $\mu = 0$  D



*cis*-1,2-dichloroethene  
bp = 60.3 °C  
 $\mu = 2.95$  D

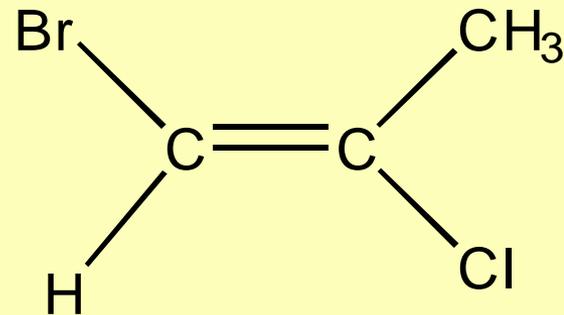
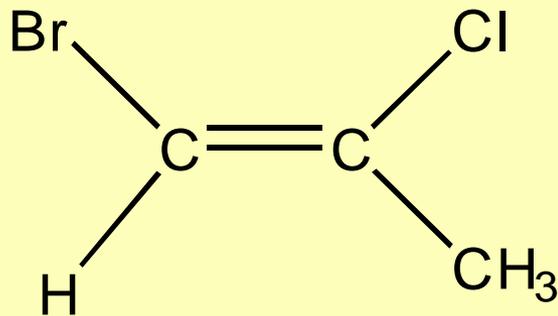


*trans*-1,2-dichloroethene  
bp = 47.5 °C  
 $\mu = 0$  D

bp = boiling point (ponto de ebulição)

# Isomeria geométrica das duplas ligações

- Problema: e quando os substituintes nos carbonos das duplas forem diferentes???



Qual é o cis e qual é o trans??

# Isomeria geométrica das duplas ligações

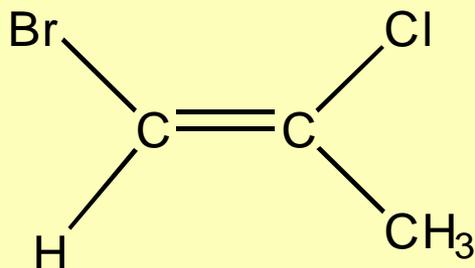
- Estabelecimento de ordem de prioridade → átomo de maior massa ligado ao carbono  $sp^2$  da dupla tem maior prioridade:



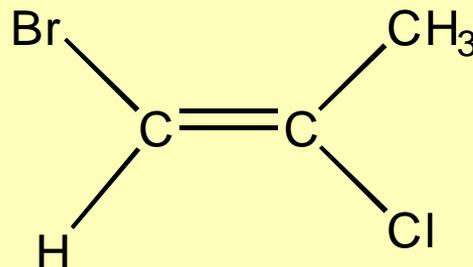
- Se o isômero apresenta os átomos de maior prioridade do mesmo lado da dupla → isômero Z (de *Zusammen*, do alemão “juntos”).
- Se o isômero apresenta os átomos de maior prioridade em lados opostos → isômero E (de *Entgegen*, do alemão “opostos”).

# Isomeria geométrica das duplas ligações

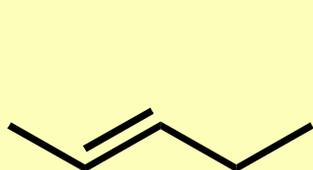
Assim...



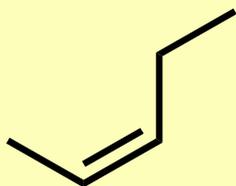
Z-1-bromo-2-cloropropeno



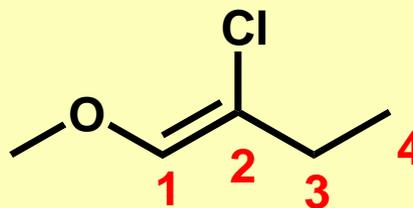
E-1-bromo-2-cloropropeno



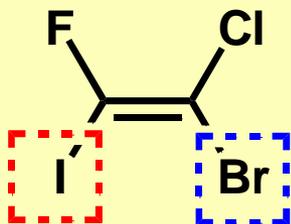
E-2-penteno



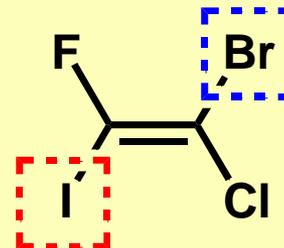
Z-2-penteno



Z-2-cloro-1-metoxi-1-buteno



Z-1-bromo-1-cloro-2-fluoro-2-iodoeteno



E-1-bromo-1-cloro-2-fluoro-2-iodoeteno

**Medicina**

# ALERTA CONTRA A GORDURA TRANS

Ganha força o movimento para banir da alimentação a mais perigosa das gorduras

Paula Neiva

A indústria alimentícia começa a fabricar uma boa notícia no Brasil: a redução e mesmo a eliminação em produtos muito consumidos da mais nociva de todas as gorduras, a trans. Criada para dar mais sabor, melhorar a consistência e prolongar o prazo de validade de alguns alimentos, a gordura trans está na pipoca de microondas, nos salgadinhos de pacotes, nos donuts, nos biscoitos, nas bolachas, nos sorvetes, nas margarinas e em vários itens das refeições de lanchonetes fast-food, como a batata frita, os nuggets e as tortinhas doces. A trans é um importante fator de risco para infartos, derrames, diabetes e outras doenças. O melhor a fazer é tentar bani-la do cardápio. Duas grandes empresas, a Unilever e a Sadia, estão a trabalhar para substituir a gordura saturada, que, con-

forme se descobriu no fim da década de 50, faz mal ao coração. Encontrada sobretudo em carnes vermelhas, ovos e leite, entre outros alimentos, a gordura saturada aumenta os níveis no sangue do mau colesterol, o LDL. Aparentemente benéfica, a trans conquistou a indústria de alimentos. "No fim da década de 90, contudo, várias pesquisas científicas demonstraram que a trans é mais nociva do que a saturada", diz a nutricionista Ana Maria Lottenberg, do Hospital das Clínicas de São Paulo. A explicação para isso é que, durante a solidificação dos óleos vegetais, as moléculas de gordura passam por um rearranjo estrutural que faz com que elas, ao ser ingeridas, facilitem o depósito de LDL nas paredes das artérias coronárias. Além disso, a trans reduz as quantidades de uma proteína essencial à produção do bom colesterol, o HDL. O novo rótulo de alimentos deve informar o consumidor

sobre a quantidade de gordura trans contida nos alimentos. O mesmo prazo foi dado para a indústria de alimentos. A gestão diária de trans não

ultrapasse 1% das calorias. Para a indústria, a dificuldade é substituir a gordura trans por uma alternativa mais saudável. A Kraft

Foods, fabricante do queijo mais consumido no mundo, lançou no mercado uma nova variedade de queijo com baixo teor de gordura. O maior desafio para a indústria de fast-food. Além de manter o sabor dos lanches, há o custo econômico a ser considerado. A indústria de alimentos pode ser reaproveitada sem perder suas características. O químico André



da pela Justiça dos Estados Unidos em 2002, o McDonald's anunciou que, no ano seguinte, cortaria a gordura trans da cozinha americana. O anúncio foi prometido, e a organização ambiental Ban Trans anunciou que gastaria um milhão e meio de dólares para promover a mudança. O McDonald's anunciou que cortaria a gordura trans de seus produtos. [www.veja.com.br](http://www.veja.com.br)

MONTAGEM SOBRE FOTOS DIVULGAÇÃO E FERNANDO LEMOS



## Quanto menos, melhor

O ideal é não consumir gordura trans. O limite máximo deve ser inferior a 1% do total de calorias ingerido diariamente. Numa dieta de 2 000 calorias, isso equivale a 2,2 gramas



PORÇÃO

QUANTIDADE DE GORDURA TRANS

Batata frita de fast-food

1 pacote grande

6 gramas

Donut

1 unidade grande

4 gramas

Nugget de frango

6 unidades

1,7 grama

Salgadinho de pacote

1 pacote médio

2 gramas

Biscoito recheado de chocolate

1 unidade

1,7 grama

Torta de maçã de fast-food

1 unidade

4,5 gramas

Pipoca microondas

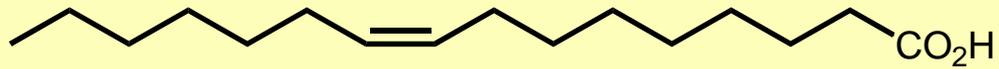
1 pacote

2,5 gramas

Fontes: Ana Lottenberg, Unilever

# Ácidos graxos insaturados

A maioria possui entre 16 e 22 átomos de carbono:



ácido palmitoléico



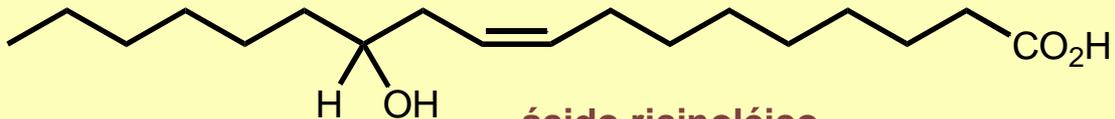
ácido oléico



ácido linoléico



ácido linolênico

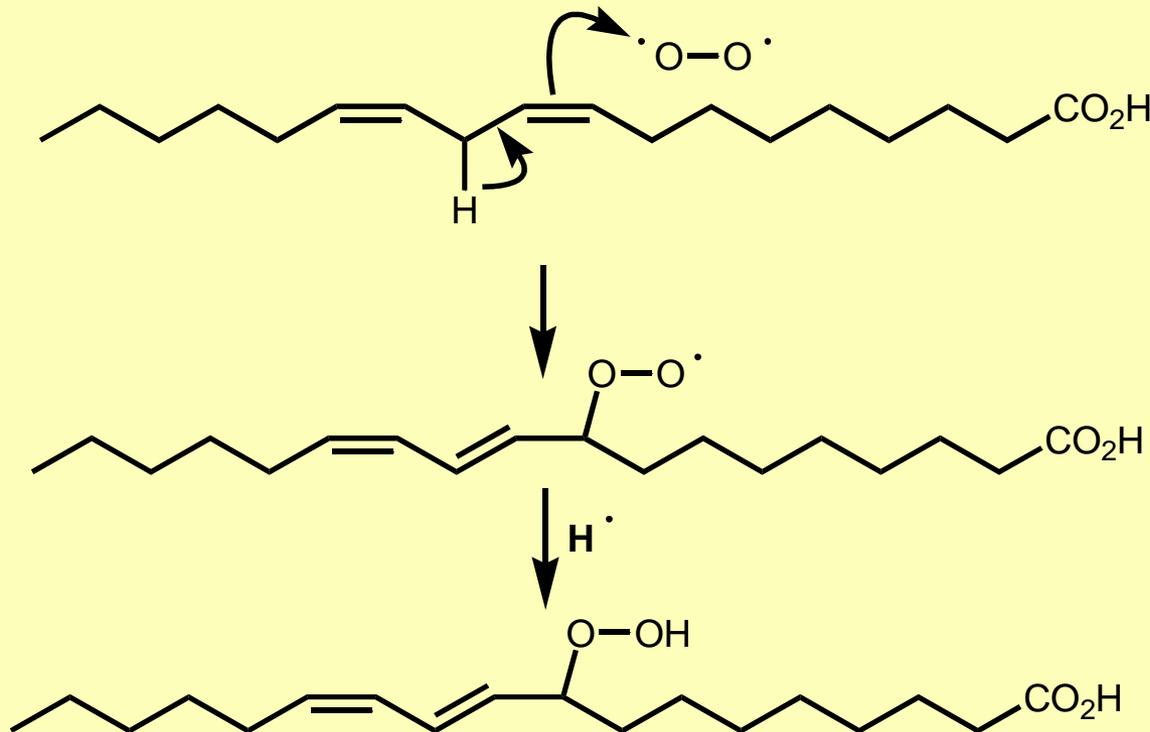


ácido ricinoléico



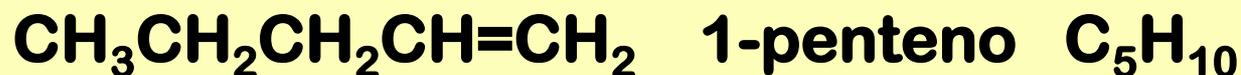
ácido araquidônico

Os ácidos graxos poliinsaturados **Z** (cis) são muito importantes na dieta humana, pois além de constituírem material de partida para a biossíntese de outros lipídios (fosfolipídios, glicolipídios, esteróis, etc.), também atuam eliminando radicais livres.



# Alcinos: estrutura, nomenclatura e propriedades químicas e físicas

- Enquanto que as estruturas dos **alcenos** **apresentam pelo menos uma dupla ligação C=C**, e sua fórmula geral é  $C_nH_{2n}$



as estruturas dos **alcinos** **apresentam pelo menos uma tripla ligação**  $\text{—C}\equiv\text{C—}$

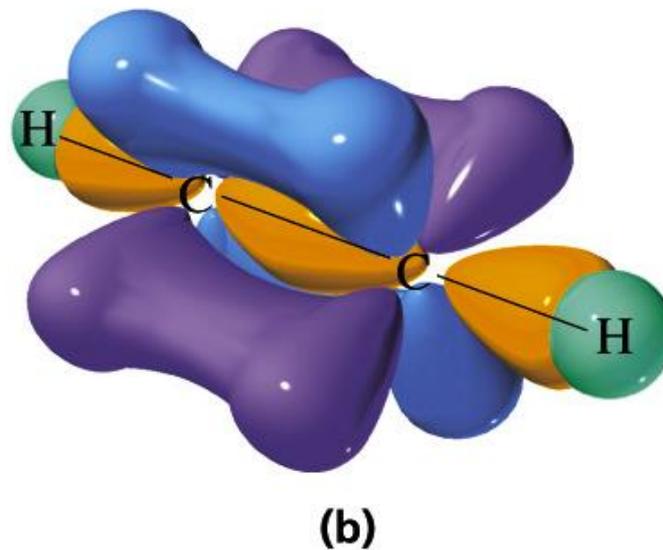
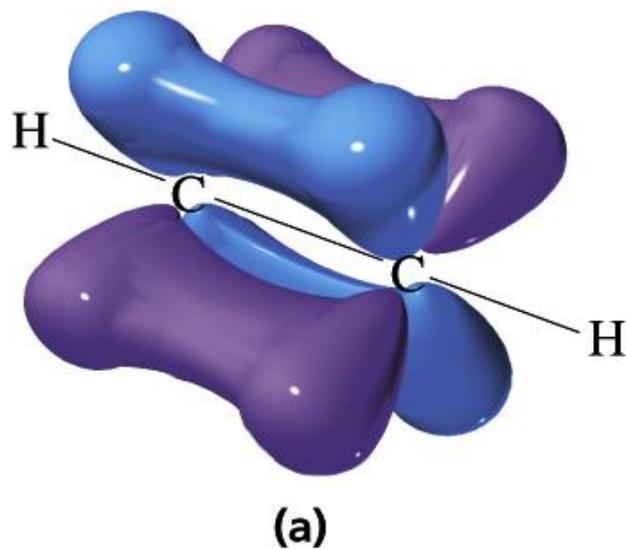
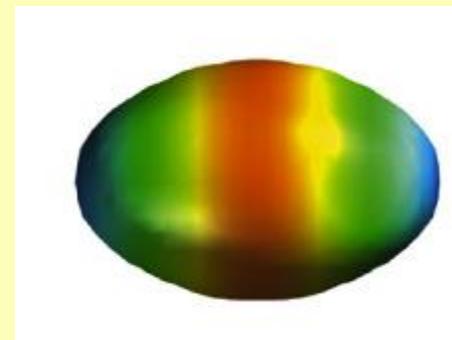
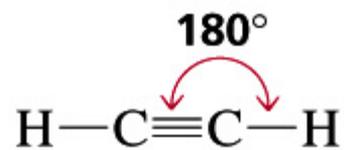
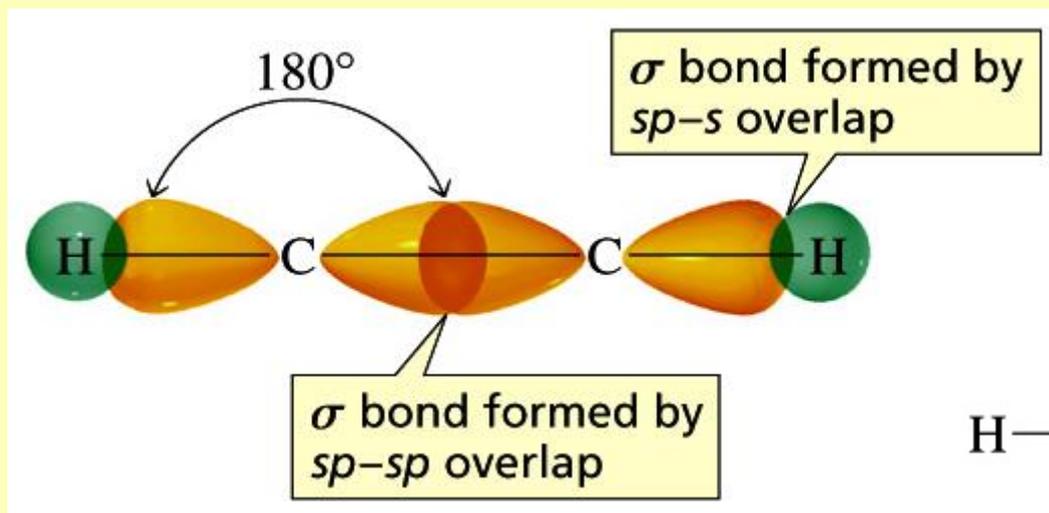


1-pentino,  $C_5H_8$

e por isso os alcinos acíclicos que apresentam uma única tripla ligação têm fórmula geral



# Alcinos: estrutura, nomenclatura e propriedades químicas e físicas



# Alcinos: estrutura, nomenclatura e propriedades químicas e físicas



etino  
ou  
acetileno



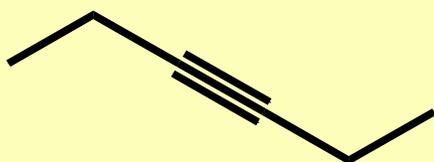
propino



1-butino



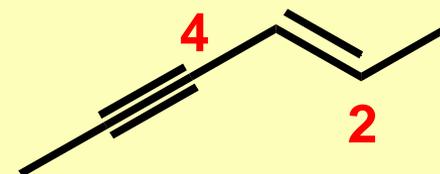
2-butino



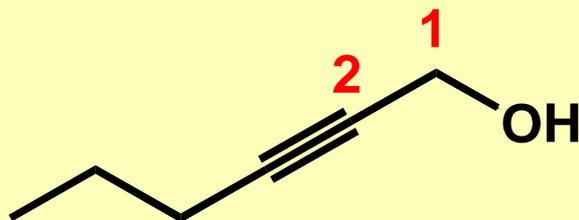
3-hexino



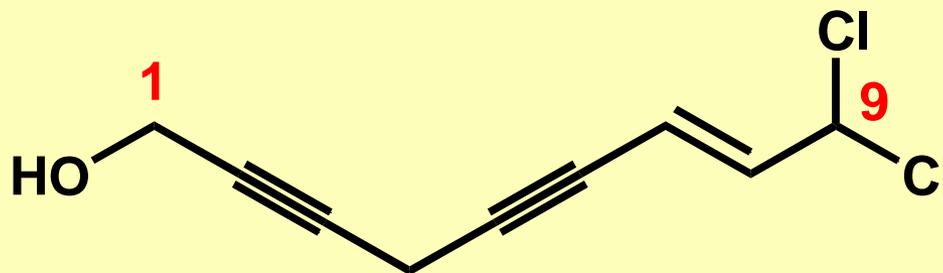
2,4,6-octatriino



E-hex-2-en-4-ino



2-hexin-1-ol



E-9,9-dicloronona-7-en-2,5-diin-1-ol

# Nomenclatura de alcinos

1. Encontre a cadeia mais longa contendo a tripla ligação, e nomeie-a como para o alcano correspondente, mas com o sufixo “ino”.
2. A tripla ligação com o menor número possível.
3. Os substituintes sempre com menor número.



ácido E-deca-2-en-4,6,8-triinoico

ou

ácido dihidromatricárico  
isolado da Camomila