Química 5 Química Orgânica I

Pré-Vestibular Teoria e Exercícios Propostos



Editora COC – Empreendimentos Culturais Ltda. Rua General Celso de Mello Rezende, 301 Tel.: (16) 603.9700 – CEP 14095-270 Lagoinha – Ribeirão Preto – SP

índice.química 5

Capitulo 01. Introdução a Química Organica
1. O Estudo do Carbono
2. Tipos de Ligações entre os Átomos de Carbono
3. Elementos Organógenos9
4. Classificação do Átomo de Carbono na Cadeia Carbônica
Capítulo 02. Classificação das Cadeias Carbônicas
1. Compostos Alifáticos 11
2. Compostos Aromáticos 13
Capítulo 03. Nomenciatura
1. Hidrocarbonetos
2. Radicais Orgânicos 17
3. Nomenclatura para Hidrocarbonetos Ramificados de Cadeia Aberta 18 3.1. Alcanos 18 3.2. Alcenos 20 3.3. Alcinos 20
4. Hidrocarbonetos Ramificados de Cadeia Fechada 21 4.1. Cicloalcano 21 4.2. Cicloalceno 21 4.3. Hidrocarbonetos Aromáticos 21
5. Álcool 23 5.1. Nomenclatura IUPAC 23 5.2. Nomenclatura Usual 24 5.3. Nomenclatura de Kolbe 24 5.4. Classificação dos Álcoois 24
6. Fenol 25
7. Aldeído
8. Cetona
9. Ácido Carboxílico

<mark>índice.química 5</mark>

	10. Éter	28
	10.1. Nomenclatura IUPAC	. 28
	10.2. Nomenclatura Usual	. 28
	11. Éster	29
	12. Sal de Ácido Carboxílico	29
	13. Haleto de Ácido	30
	14. Anidrido	. 30
	15. Aminas	. 30
	16. Amidas	31
	17. Nitrilas 17.1. Nomenclatura IUPAC	. 32
	17.2. Nomenciatura Usuai	. 32
	18. Nitro Composto	. 32
	19. Haletos Orgânicos	33
	19.1. Nomenclatura IUPAC	. 33
	19.2. Nomenclatura Usual	. 33
Ca	pítulo 04. Isomeria	
	1. Isomeria Plana	35
	1.1. Isomeria de Função ou Isomeria Funcional	. 35
	1.2. Isomeria de Cadeia	. 35
	1.3. Isomeria de Posição	. 36
	1.4. Isomeria de Compensação ou Metameria	.3/

 1.5. Tautomeria ou Isomeria Dinâmica
 37

 2. Isomeria Espacial
 37

 2.1. Isomeria Geométrica ou Cis-Trans
 38

 2.2. Isomeria Óptica
 40

Química Orgânica I

Capítulo 01. Introdução à Química Orgânica

Em 1777, o cientista Torben Olof Bergman empregou pela primeira vez o termo Química Orgânica. Esta era considerada como a Química dos produtos de origem dos organismos vivos, animal ou vegetal, enquanto a química Inorgânica era a química que estudava os compostos extraídos do reino mineral.

§.05

No início do século passado, Jons Jacob Freiherr Von Berzelius sugeriu a teoria da Força Vital. Acreditava-se que os organismos vivos (plantas e animais) continham uma "força vital" que caracterizava todos os compostos produzidos por eles. Deste modo, não se admitia a possibilidade de compostos orgânicos virem a ser sintetizados em laboratório. Berzelius justificava tal fato afirmando que compostos orgânicos só eram obtidos pela ação da força vital, e que esta só podia estar relacionada à célula viva.

O químico alemão Friedrich Wöhler, discípulo de Berzelius, em 1828, aquecendo cianato de amônio, obteve, em laboratório, a substância uréia, um composto considerado na época tipicamente orgânico (existe na urina), embora não houvesse a interferência de um organismo vivo que lhe transferisse a "força vital".

Síntese de Wöhler

NH ₄ ⁺ CNO ⁻ –	Δ $O = C \bigvee_{NH_2}^{NH_2}$
Cianato de amônio	Uréia

A uréia é uma substância resultante do metabolismo da matéria nitrogenada. É utilizada em larga escala como adubo.

A síntese de Wöhler foi a primeira grande prova contra a teoria da Força Vital, deixando claro que os compostos orgânicos não precisam necessariamente ser obtidos só a partir de organismos vivos.

Procurou-se, então, um novo conceito para a Química Orgânica. E, em 1848, Leopold Gmelin chamou a atenção para o fato de que todos os compostos orgânicos até então descobertos continham carbono; por isso, em 1859, August Kekulé define a Química Orgânica como a parte da Química que estuda os compostos do elemento carbono.

A Química Orgânica é a química dos corantes e produtos farmacêuticos; do papel e da tinta de escrever; das tintas, dos vernizes e dos plásticos; da gasolina e da borracha; dos produtos alimentícios e de vestuário. O estudo dos processos biológicos pertence, em última análise, à Química Orgânica.

Como o carbono é a unidade fundamental dos compostos orgânicos, torna-se necessário um conhecimento mais profundo desse elemento para que possamos entender a Química Orgânica.

1. O Estudo do Carbono

A estrutura dos compostos orgânicos começou a ser desvendada a partir da segunda metade do século XIX com as idéias de Couper e de Kekulé sobre o comportamento químico do carbono. Essas idéias são hoje conhecidas como **postulados de Kekulé** – a base da Química Orgânica.

I. Primeiro Postulado

O átomo de carbono é tetravalente

Nos compostos orgânicos, o átomo de carbono pode estabelecer até quatro ligações com outros átomos, isto é, o carbono é tetravalente. As quatro valências são representadas por quatro tracinhos (-).

$$C$$
 C $-$

A tetravalência do carbono é decorrente da existência de quatro elétrons na sua camada de valência.

Dessa maneira, o carbono precisa emparelhar os seus quatro elétrons da camada de valência para adquirir configuração de gás nobre (oito elétrons na camada de valência = 4 pares).

II. Segundo Postulado

As quatro valências do carbono são iguais entre si

Pode-se explicar o fato de o carbono apresentar as quatro valências iguais por meio da existência, por exemplo, de apenas um composto, denominado clorometano ou cloreto de metila CH₃Cl.

Se as quatro valências fossem diferentes, deveríamos ter quatro moléculas diferentes para o composto CH₃Cl.

$$\begin{array}{cccc} H & H \\ H - C - Cl & H - C - H \\ H & Cl \\ H & Cl \\ Cl - C - H & H - C - H \\ H & H \\ H & H \end{array}$$

8

Como só existe um composto com a fórmula CH_3Cl , as quatro representações apresentadas devem ser consideradas como iguais e, conseqüentemente, as quatro valências equivalem-se.

III. Terceiro Postulado

Propriedade do encadeamento

Os átomos de carbono podem ligar-se entre si formando cadeias. Isso explica o fato de existirem mais de quatro milhões de compostos orgânicos. Os átomos de carbono podem formar cadeias abertas ou fechadas (anéis); tanto as cadeias abertas como as fechadas podem se ramificar e ligar-se umas às outras:



A capacidade de formar cadeia não é exclusiva do carbono, pois ocorre também com outros elementos, tais como: silício (IVA), enxofre, fósforo, nitrogênio e oxigênio; no entanto, no carbono é muito pronunciada, a tal ponto que se conhecem milhões de compostos orgânicos de cadeias distintas.

Capítulo 01. Introdução à Química Orgânica



2. Tipos de Ligações entre os Átomos de Carbono

2.1. Teoria de Le Bel e Van't Hoff

Em 1874, Le Bel e Van't Hoff propuseram uma estrutura tetraédrica para o átomo de carbono:

O átomo de carbono situa-se no centro de um tetraedro imaginário, estando cada uma de suas valências dirigida para um dos vértices do tetraedro.

Portanto, para a molécula do metano (CH_4) , teríamos a seguinte representação:



Cada átomo de carbono pode ligar-se a um outro átomo de carbono por intermédio de um, dois ou três pares covalentes, formando o que chamamos de ligação simples, ligação dupla e ligação tripla.

- 4 ligações simples: C —
- 2 ligações simples e uma dupla: -C =
- − 1 ligação simples e uma tripla: $-C \equiv$
- 2 ligações duplas: = C =

2.2. Cadeias Carbônicas

As cadeias carbônicas podem ser representadas da seguinte maneira:

Fórmula estrutural

$$\begin{array}{cccc} H & H & H \\ I & I & I \\ H - C - C - C - C - H \\ I & I & I \\ H & H & H \end{array}$$

Fórmula estrutural condensada

 $CH_3 - CH_2 - CH_3$

Obs. – Todos os átomos que estão ligados ao carbono são normalmente colocados imediatamente após este carbono.

3. Elementos Organógenos

Não existe base científica na divisão da Química em orgânica e inorgânica, pois as leis básicas da Química valem tanto para os compostos orgânicos como para os inorgânicos.

São conhecidos mais de quatro milhões de compostos orgânicos diferentes. No entanto, esses compostos são formados por poucos elementos, tendo-se fundamentalmente: C, H, O e N; em menor freqüência aparecem: Cl, Br, I, S e P. Todos estes elementos são denominados elementos organógenos, isto é, são os elementos que compõem as funções orgânicas.

Apesar da maior diversidade de elementos nos compostos inorgânicos (NaCl, Ca(NO₃)₂, FeS, H₂O, RbH, NO₂, K₂Cr₂O₇, CuBr₂, etc.), ainda assim o número de compostos orgânicos é bem superior ao número de compostos inorgânicos.

É conveniente enfatizar que alguns compostos que contêm carbono são abordados na Química Inorgânica. São eles: monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO₂); os carbonatos (CaCO₃, H_2 CO₃, etc.), os cianetos (KCN, NaCN, etc.). Portanto, lembre-se sempre de que :

Todo composto orgânico possui carbono; porém nem todo composto com carbono é orgânico.

4. Classificação do Átomo de Carbono na Cadeia Carbônica

I. Carbono Primário (P)

É todo átomo de carbono ligado, no máximo, a outro átomo de carbono.

Obs. – Todo carbono isolado por extensão é considerado primário.

Exemplo:
$$H - C - H$$

H

II. Carbono Secundário (S)

É o que se liga a dois outros átomos de carbono.

III. Carbono Terciário (T)

É o que se liga a três outros átomos de carbono.

IV. Carbono Quaternário (Q)

É o que se liga a quatro outros átomos de carbono.

PV2D-06-QUI-51



Note que a classificação dos carbonos não depende do tipo de ligação (simples, dupla ou tripla) entre os carbonos:

$$H - \overset{P}{\underset{H}{C}} = \overset{S}{\underset{H}{C}} - \overset{P}{\underset{H}{C}} - H$$
$$H - \overset{P}{\underset{H}{C}} = \overset{S}{\underset{C}{C}} = \overset{S}{\underset{H}{C}} - \overset{S}{\underset{H}{C}} = \overset{P}{\underset{H}{C}} - H$$

Capítulo 02. Classificação das Cadeias Carbônicas

Os compostos orgânicos são divididos em duas grandes classes: compostos alifáticos e compostos aromáticos.

Compostos alifáticos são os compostos de cadeia aberta mais os compostos cíclicos que se assemelham aos compostos de cadeia aberta.

Exemplo

$$\begin{array}{c} \mathrm{CH}_3-\mathrm{CH}_2-\mathrm{CH}_3 \hspace{0.1 cm}; \hspace{0.1 cm} \mathrm{CH}_2-\mathrm{CH}_2 \\ \hspace{0.1 cm} | \hspace{0.1 cm} | \\ \mathrm{CH}_2-\mathrm{CH}_2 \end{array}$$

Compostos aromáticos são o benzeno e os compostos que se assemelham ao benzeno em comportamento químico.

O benzeno pode ser representado:



Também pode ser representado pelas formas abaixo:



Portanto, são considerados aromáticos os compostos que representam, pelo menos, um anel benzênico. Por exemplo:



1. Compostos Alifáticos

Os compostos alifáticos podem ser classificados em:

I. Quanto ao encadeamento dos átomos de carbono

Cadeia aberta ou acíclica

São aquelas cadeias em que os átomos de carbono não formam ciclos.

$$H_3C - CH_2 - CH_2 - CH_3$$

$$\begin{array}{c} H_{3}C - CH_{2} - CH - CH_{2} - CH_{3} \\ \\ I \\ CH_{3} \end{array}$$

• Cadeia Fechada, Cíclica ou Alicíclica

São as cadeias onde os átomos de carbono formam anéis ou ciclos.





Observação – Alguns autores distinguem também o que chamam de cadeias mistas, isto é, cadeias formadas de uma parte aberta e uma parte fechada.

$$H_{2}C \xrightarrow{C-H_{2}}_{H_{2}C-CH_{2}-CH_{2}-CH_{3} \text{ ou }} O^{-CH_{2}-CH_{2}-CH_{3}}_{H_{2}C-CH_{2}-CH_{2}-CH_{3}}$$

Capítulo 02. Classificação das Cadeias Carbônicas

Química Orgânica I

II. Quanto à disposição dos átomos de carbono

Cadeia normal

Todos os átomos de carbono pertencentes à cadeia encontram-se numa única sequência.

Exemplos

$$CH_3 - CH_2 - CH_2 - CH_3$$
;

Cadeia ramificada

Os átomos de carbono pertencentes à cadeia apresentam mais de uma sequência.

Exemplo

$$CH_3 - CH - CH_3 ;$$

$$I$$

$$CH_3 - CH_2 - CH_3$$

III. Quanto à ligação química entre os carbonos

Cadeia Saturada

É aquela em que os átomos de carbono ligam-se entre si, exclusivamente, por ligações simples.

$$H_3C - CH_2 - CH_3$$

Saturada

$$H_3C - CH_2 - CH_2 - C$$

Saturada

$$H_3C - C \equiv N$$
Saturada



PV2D-06-QUI-51

Cadeia Insaturada

É aquela em que pelo menos dois átomos de carbono estão ligados por uma dupla ou tripla ligação.

$$H_3C - CH = CH_2$$

Insaturada

$$H_{3}C - C \equiv C - CH_{3}$$
Insaturada



- Insaturada
- IV. Quanto à natureza dos átomos que formam a cadeia

• Cadeia Homogênea

É aquela que não apresenta átomos diferentes de carbono intercalados na cadeia, isto é, não apresenta heteroátomo.

> $H_3C - CH_2 - CH_3$ Homogênea

> $H_3C - CH_2 - OH$ Homogênea





Cadeias fechadas e homogêneas podem ser classificadas como homocíclicas.

Capítulo 02. Classificação das Cadeias Carbônicas

12



Apresenta átomo diferente do carbono no meio da cadeia carbônica. Esses átomos são denominados de heteroátomos, sendo que os mais frequentes são: oxigênio, nitrogênio e enxofre.

Exemplo

$$H_3C - O - CH_3$$

/
Heteroátomo

$$H_{3}C - CH_{2} - N = CH_{2}$$

$$H_{3}C - CH_{2} - N = CH_{2}$$

$$H_{2}C CH_{2}$$

$$H_{2}C CH_{2}$$

UC - CU

Heteroátomo

Cadeias fechadas e heterogêneas podem ser denominadas de heterocíclicas

Observação – A cadeia cíclica ramificada abaixo é uma cadeia denominada de heterogênea, pois apresenta heteroátomo. Como este não faz parte do ciclo, não podemos classificar tal cadeia em heterocíclica.

$$H_2C - CH_2$$

$$| \qquad |$$

$$H_2C - CH - O - CH_3$$

Não é heterocíclica



Classificação: Alicíclica Saturada <u>Ramificada</u> Heterogênea

Condição para ser Heteroátomo:

Somente os átomos com valência maior que 1 podem ser heterátomos. O hidrogênio é monovalente assim como Cl, Br, I, F são monovalentes e, sendo assim, nunca serão heteroátomos.

2. Compostos Aromáticos

Possuem, pelo menos, um anel benzênico.

De acordo com o número de núcleos benzênicos, as cadeias aromáticas podem ser classificadas em:

I. Cadeias mononucleares

Apresentam apenas um anel benzênico. **Exemplos**



II. Cadeias polinucleares Apresentam dois ou mais anéis benzênicos.

Existem dois grupos:

• Núcleos isolados: os anéis não possuem átomos de carbono em comum.

Exemplos



• Núcleos condensados: os anéis apresentam átomos de carbono em comum.

Exemplos



Capítulo 03. Nomenciatura

A nomenclatura de compostos orgânicos segue as regras elaboradas pela IUPAC (sigla da International Union of Pure and Applied Chemistry, isto é, União Internacional de Química Pura e Aplicada).

A nomenclatura IUPAC é considerada como sendo a nomenclatura oficial dos compostos orgânicos, mas ainda persistem, até hoje, outros tipos de nomenclatura, como veremos nas funções.

Uma substância orgânica de cadeia normal pode ter o seu nome dividido em três partes:

prefixo + saturação + sufixo

Os **prefixos** são extraídos do numeral grego ou latino.

1 C – Met	6 C – Hex	11 C – Undec
2 C – Et	7 C – Hept	12 C – Dodec
3 C – Prop	8 C – Oct	20 C – Eicos
4 C – But	9 C – Non	30 C – Triacont
5 C – Pent	10 C – Dec	40 C – Tetracont

A **saturação** é definida de acordo com o tipo de ligação ente os carbonos.

AN – Cadeia saturada

EN – Uma dupla-ligação

IN – Uma tripla ligação

Caso apareça mais de uma dupla ou tripla ligação na cadeia, os termos DI, TRI, etc. devem anteceder En ou IN.

Exemplo

DIEN – duas duplas TRIEN – três duplas DIIN – duas triplas TRIIN – três triplas O **sufixo** está associado a cada uma das funções orgânicas. Cada função possui um sufixo diferente, como veremos a seguir. Portanto, quando encontramos um nome, de acordo com a IUPAC, devemos dividi-lo em três partes:

 $PENTANO = \underbrace{PENT}_{n^{\circ} de} \underbrace{AN}_{saturação} \underbrace{O}_{hidrocarboneto}$

 $CH_3 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_3$

1. Hidrocarbonetos

São compostos formados somente por carbono e hidrogênio. São substâncias apolares e suas moléculas se mantêm unidas por forças de Van der Waals. Possuem, portanto, baixo ponto de fusão e ebulição em comparação a compostos polares.

Quanto à fase de agregação, podemos fazer a seguinte generalização, à temperatura e pressão ambientes: os hidrocarbonetos que possuem de 1 a 4 carbonos são gasosos, de 5 a 17 carbonos são líquidos e acima de 17 carbonos são sólidos.

Dissolvem-se apenas em substâncias apolares (semelhante dissolve semelhante), sendo insolúveis em água.

São menos densos que a água, por dois motivos principais:

1) os átomos que os formam possuem massas atômicas baixas (C = 12) (H = 1);

2) suas moléculas, sendo apolares, tendem a ficar mais distantes entre si, o que implica menos moléculas por unidade de volume.

Quanto à aplicação, esses compostos formam toda a matéria-prima da indústria petroquímica, que produz desde plástico, fibras têxteis, borrachas sintéticas, até tintas, detergentes e fertilizantes agrícolas.



São também usados como combustíveis.

Segundo a IUPAC, o sufixo para os hidrocarbonetos é **O**. Eles estão divididos em várias subclasses, sendo as mais importantes:

I. Alcanos ou Hidrocarbonetos Parafínicos

São hidrocarbonetos acíclicos e saturados. Apresentam como fórmula geral $C_nH_{2n+2'}$ em que **n** é um número inteiro.

Exemplo

 CH_4 ; C_2H_6 ; C_3H_8 ; C_4H_{10} ; C_5H_{12} A nomenclatura para os alcanos fica:

 $CH_4 = METANO = \underbrace{MET}_{1 C} \underbrace{AN}_{cadeia} \underbrace{O}_{hidrocarboneto}$ $CH_3 - CH_3 = ETANO$ $CH_3 - CH_2 - CH_3 = n-PROPANO$ $CH_3 - CH_2 - CH_2 - CH_3 = n-BUTANO$ (n = normal)

II. Alcenos, Alquenos, Olefinas ou Hidrocarbonetos Etilênicos

São hidrocarbonetos acíclicos, contendo uma dupla-ligação. Apresentam fórmula geral C_nH_{2n} , com n \geq 2.

Exemplo

 $C_2H_4; C_3H_6; C_4H_8$

A nomenclatura é semelhante à dos alcanos, apenas trocando o termo que indica saturação **AN** por **EN**.

$$CH_2 = CH_2 \qquad ETENO \qquad \underbrace{ET}_{n^\circ de}_{carbonos} \underbrace{EN}_{saturação} \underbrace{O}_{função}$$

 $CH_2 = CH - CH_3$ PROPENO

Devemos numerar as cadeias mais longas pela extremidade mais próxima da dupla-ligação. Ao citar o nome, também devemos colocar a posição da dupla-ligação.

Exemplo

$$^{1}CH_{2} = ^{2}CH - ^{3}CH_{2} - ^{4}CH_{3}$$
 1-BUTENO

$${}^{1}CH_{3} - {}^{2}CH = {}^{3}CH - {}^{4}CH_{3}$$
 2-BUTENO

Observação

Quando encontramos hidrocarbonetos com mais de uma dupla-ligação, a cadeia principal é a mais longa possível que contenha as duplas-ligações. A numeração da cadeia principal deve ser feita de modo que as duplas fiquem com os menores números possíveis.

$$^{1}CH_{2} = ^{2}CH - ^{3}CH = ^{4}CH - ^{5}CH_{3}$$

(Alcadieno) 1,3-Pentadieno

Note que o termo que indica a saturação é precedido pelo prefixo DI, duas duplas.

$$H_2^{6}C = {}^{5}CH - {}^{4}CH = {}^{3}CH - {}^{2}CH = {}^{1}CH_2$$

(Alcatrieno) 1,3,5 - Hexatrieno

III. Alcinos, Alquinos ou Hidrocarbonetos Acetilênicos

São hidrocarbonetos acíclicos, contendo uma única tripla ligação. A sua fórmula geral pode ser representada por C_nH_{2n-2} em que $n \ge 2$.

Exemplo

 C_2H_2 ; C_3H_4 ; C_4H_6 ; C_5H_8

As regras de nomenclatura são as mesmas dos alcenos e alcapolienos, apenas trocando o termo que indica a saturação EN por IN.

Exemplo

CH=CH ETINO
$$\underset{arbonos}{\text{ET}}$$
 $\underset{saturação}{\text{ET}}$ $\underset{saturação}{\text{IN}}$ $\underset{saturação}{O}$

 $^{1}CH \equiv ^{2}C - ^{3}CH_{2} - ^{4}CH_{3}$ 1-BUTINO

IV. Cicloalcano, Ciclano ou Cicloparafina

São hidrocarbonetos cíclicos e saturados. Apresentam como fórmula geral C_nH_{2n} com $n \ge 3$.

Exemplo

 $C_{3}H_{6}; C_{4}H_{8}; C_{5}H_{10}$

Cicloalcanos com somente um anel são nomeados pela união do prefixo **ciclo** aos nomes dos alcanos que possuem o mesmo número de átomos de carbono.

Exemplo



V. Cicloalcenos, Cicloalquenos, Ciclenos ou Ciclolefinas

São hidrocarbonetos alicíclicos com uma dupla-ligação . A sua fórmula geral fica:

 $C_n H_{2n-2}$, com $n \ge 3$.

Exemplo: C_3H_4 ; C_4H_6 ; C_5H_8 .

A nomenclatura é feita acrescentando o prefixo **ciclo** ao nome do alceno que possui o mesmo número de átomos de carbono.

Exemplos



Ciclopropeno

Ciclobuteno

VI. Hidrocarbonetos Aromáticos

São os que possuem um ou mais núcleos benzênicos. A estrutura fundamental dos aromáticos é o benzeno.

A estrutura do benzeno pode ser representada:



As estruturas apresentadas diferem apenas no arranjo dos elétrons, ou seja, observase uma deslocalização dos elétrons, que recebe o nome de ressonância.

O benzeno é um híbrido das duas estruturas que, por questão de comodidade, representaremos por um hexágono regular com um círculo no interior; subentende-se que a cada vértice do hexágono se encontra ligado um átomo de hidrogênio, a menos que se indique a existência de outro átomo ou grupo de átomos.



Encontramos também hidrocarbonetos aromáticos polinucleares, dentre os quais destacamos o naftaleno. O naftaleno é um híbrido de ressonância de três estruturas:



Radicais são grupamentos atômicos que possuem uma ou mais valências livres (elétrons não emparelhados). Destacamos, a seguir, os principais radicais orgânicos:

I. Radicais Alquilas

São radicais monovalentes (possuem uma única valência livre) e saturados. Derivam dos alcanos, pela eliminação do H da molécula.

A nomenclatura fica:

prefixo + il ou ila

 $CH_4 = Metano \rightarrow CH_3 - = Metil ou Metila$ $CH_3 - CH_3 = Etano \rightarrow CH_3 - CH_2 - = Etil ou$ Etila

$$CH_3 - CH_2 - CH_3 = n \text{-} \text{propano} \begin{cases} CH_3 - CH_2 - CH_2 - end reproprial \\ CH_3 - CH_2 - CH_2 - end reproprial \\ CH_3 - CH_3 - CH_3 \\ CH_3 - CH_3 = end reproprial \\ CH_3 - CH_3 \\ CH_3 \\$$

$$CH_{3} - CH_{2} - CH_{2} - CH_{3} = n-butano \begin{cases} CH_{3} - CH_{2} - CH_{2} - CH_{2} - m-butil (a) \\ \\ CH_{3} - CH_{2} - CH_{3} - CH_{3} - CH_{3} \end{bmatrix} = sec-butil (a)$$

$$CH_{3} - CH - CH_{3} = Isobutano \begin{cases} CH_{3} - CH - CH_{2} - I = Isobutil(a) \\ CH_{3} \\ CH_{3} \\ CH_{3} \\ CH_{3} - C - I = terc-butil (a), t-butil (a) ou tércio-butil \\ CH_{3} \\ CH_{3}$$

II. Radicais Alquenilas

São radicais monovalentes derivados de alcenos.

A nomenclatura fica:

prefixo + saturação + IL ou ILA

 $CH_2 = CH - = Etenil(a)$ ou vinil(a)

Os dois nomes estão de acordo com a IUPAC.

III. Radicais Arilas

São radicais monovalentes cuja valência livre se encontra num carbono pertencente a um núcleo aromático. Os principais radicais são:



(Valência livre localizada em qualquer um dos carbonos do núcleo aromático)



18

IV. Radical Benzil

Há ainda um radical muito importante que não pode ser enquadrado em nenhum dos grupos estudados, devido às suas características especiais.



Possui um núcleo aromático ligado a um carbono, no qual se localiza a valência livre.

3. Nomenclatura para Hidrocarbonetos Ramificados de Cadeia Aberta

3.1. Alcanos

As regras estabelecidas pela IUPAC para os alcanos ramificados são:

- localizar a cadeia contínua mais longa de átomos de carbono. Esta cadeia é denominada de cadeia principal. Se existirem várias de mesmo número de carbonos, a principal corresponde à que possuir maior número de grupos substituintes;
- numerar a cadeia principal começando pela extremidade mais próxima dos grupos substituídos;
- use os números da regra anterior para designar a localização de cada grupo substituinte;
- quando houver dois ou mais grupos substituintes, numeramos a cadeia pela extremidade mais ramificada (menores números para os grupos substituintes);
- quando dois grupos substituintes estão presentes no mesmo átomo de carbono, usamos este número duas vezes;
- quando dois ou mais grupos substituintes são iguais, são indicados pelo uso dos prefixos **di**, **tri**, **tetra** e assim por diante;

- quando a primeira ramificação ocorrer em ambas as extremidades em posições iguais, numeramos a cadeia de modo a obter os menores números para as ramificações;
- os nomes dos grupos substituintes devem ser mencionados em ordem alfabética. Nessa ordem não devem ser levados em consideração os prefixos di, tri, tetra..., bem como aqueles separados dos radicais por hífen. Por exemplo, terc-butil antecede o etil, mas o etil antecede o isobutil.

Observação – A partir de 1979, por determinação da IUPAC, foi abolida a nomenclatura de compostos ramificados, em que os grupos substituintes são mencionados em ordem de complexidade; portanto, fazer uso dessa nomenclatura, atualmente, significa trabalhar de maneira incorreta.

De acordo com as regras mencionadas, vamos dar nome aos compostos abaixo:

$${}^{6}\text{CH}_{3}$$
- ${}^{5}\text{CH}_{2}$ - ${}^{4}\text{CH}_{2}$ - ${}^{3}\text{CH}_{2}$ - ${}^{2}\text{CH}_{3}$ - ${}^{1}\text{CH}_{3}$
2-metil-hexano

$$^{7}CH_{3}$$
 $-^{6}CH_{2}$ $-^{5}CH_{2}$ $-^{4}CH_{2}$ $-^{3}CH$ CH_{3}
 $^{2}CH_{2}$
 $^{1}CH_{3}$

3-metil-heptano

$${}^{1}CH_{3} - {}^{2}CH - {}^{3}CH_{2} - {}^{4}CH - {}^{5}CH_{2} - {}^{6}CH_{3}$$

 $| \qquad | \qquad | \qquad CH_{3} \qquad CH_{2}$
 $| \qquad CH_{3} \qquad H_{3}$
 4 -etil-2-metil-hexano

$${}^{CH_3}_{1} - {}^{2}CH_2 - {}^{3}C - {}^{4}CH_2 - {}^{5}CH_2 - {}^{6}CH_3$$

$${}^{1}_{1}CH_2$$

$${}^{1}_{1}CH_2$$

$${}^{1}_{1}CH_3$$
3-etil-3-metil-hexano

2,3-dimetil-butano

Existem outras nomenclaturas além da IUPAC, a saber:

$$CH_3 - CH - CH_3$$

 I
 CH_3

isobutano

$$\begin{array}{c} CH_3 - CH - CH_2 - CH_3 \\ I \\ CH_3 \end{array}$$

isopentano

Note que estes compostos apresentam em co-

mum o grupo $CH_3 - CH_3$, denominado de **iso.**

$$CH_3$$

O nome do composto é relacionado ao número total de carbonos.

Encontramos também derivados do metano, pela substituição de seus átomos de H por radicais. O nome ao alcano é dado citando primeiro os grupos substituintes seguidos da palavra metano.

$$H$$

 L
 $CH_3 - C - CH_2 - CH_3$
 H

metil-etil-metano

$$CH_3 - CH_3 - CH_2 - CH_3 -$$

trimetil-etil-metano

3.2. Alcenos

As regras de nomenclatura são semelhantes às dos alcanos, trocando o termo que indica a saturação **AN** por **EN**. As seguintes regras devem ser acrescentadas:

- a cadeia principal é a mais longa possível, que contenha a dupla-ligação;
- a cadeia principal é numerada a partir da extremidade próxima da dupla-ligação, independendo dos grupos substituintes presentes na cadeia;
- o nome é dado citando-se inicialmente a posição e nome dos grupos substituintes, a posição da dupla e, finalmente, o nome da cadeia principal.

Exemplos

$${}^{5}CH_{3} - {}^{4}CH - {}^{3}CH_{2} - {}^{2}CH = {}^{1}CH_{2}$$

 $| CH_{3}$

4-metil-1-penteno

3-etil-2,5-dimetil-3-hexeno

Obs. – Como a dupla-ligação encontra-se no meio da cadeia, iniciamos a numeração pela extremidade mais ramificada.

Existe uma nomenclatura, não-oficial, em que os alcenos são considerados derivados

do etileno, pela substituição de átomos de H pelos radicais.

$$CH_2 = CH_2$$
 etileno

$$CH_3 - CH = CH - CH_3$$

1,2-dimetil etileno

$$CH_3 \\ \downarrow \\ CH_3 - C = CH - CH_3$$

1,1,2-trimetil etileno

3.3. Alcinos

As regras de nomenclatura são as mesmas dos alcenos, apenas trocando o termo que indica a saturação **EN** por **IN**.

Exemplos

3,4-dimetil-1-pentino





Encontramos uma nomenclatura, não-oficial, em que os alcinos são derivados do acetileno.

CH≡CH acetileno

 $CH_3 - C \equiv C - CH_2 - CH_3$ metil-etil-acetileno

 $CH_3 - C \equiv CH$ metil-acetileno

Capítulo 03. Nomenciatura

PV2D-06-QUI-51



4.Hidrocarbonetos Ramificados de Cadeia Fechada

4.1. Cicloalcano

Se somente um substituinte está presente, não é necessário designar a posição.





Etilciclopentano

Quando dois substituintes estão presentes, nós numeramos o anel começando com o primeiro substituinte em ordem alfabética, e numeramos na direção do próximo substituinte, dando-lhe o menor número possível.



Quando três ou mais substituintes estão presentes, nós começamos pelo substituinte que conduza aos menores números para as posições dos outros substituintes.



2-etil-1,4-dimetil-cicloexano



4.2. Cicloalceno

Para cicloalcenos substituídos, a numeração do ciclo é feita a partir do carbono da dupla ligação, de modo que a dupla ligação fique entre os carbonos 1 e 2. A numeração segue no sentido dos menores números para os substituintes. Exemplo:



3-metil-cicloexeno



3-etil-1-metil-1-ciclopenteno

4.3. Hidrocarbonetos Aromáticos

Os hidrocarbonetos com um único núcleo benzênico e uma ou mais ramificações são chamados de hidrocarbonetos alquil-benzênicos. A nomenclatura é semelhante aos cicloalcanos, trocando a terminação para **benzeno**. Exemplo:



metilbenzeno (tolueno)



isopropilbenzeno (cumeno)

Capítulo 03. Nomenciatura

Ouímica Orgânica I

 \bigcirc

ĊH₃



 CH_3 1-etil-2,4-dimetil-benzeno

Caso existam duas ramificações no núcleo, são bastante usados os prefixos:

- orto (o), quando os dois substituintes se encontram nas posições 1,2;

 meta (m), quando os dois substituintes se encontram nas posições 1,3;

- para (p), quando os dois substituintes se encontram nas posições 1,4.



 CH_3 6 ĊH₂ CH₃

paraetil-metil-benzeno ou 1-etil-4-metilbenzeno

Para hidrocarbonetos aromáticos de núcleos condensados, destacamos o naftaleno,



onde as posições 1,4,5 e 8 são chamadas de posições α e 2,3,6 e 7 são chamadas de posições β .

Exemplo:



1-etil-naftaleno ou α-etilnaftaleno

Para estruturas mais complexas, considerar o anel benzênico como um radical e não como cadeia principal. Por exemplo:



3-fenil-2-metil-pentano



fenil-benzeno



^{1,2-}difeniletano

22

5. Álcool

Composto orgânico derivado dos hidrocarbonetos pela substituição de hidrogênio de carbono saturado por – OH, a hidroxila.

Exemplos

$$CH_3 OH;$$
 $CH_3 - CH - CH_3$

5.1. Nomenciatura IUPAC

Na nomenclatura dos álcoois utilizamos o sufixo **OL** para indicar o grupo funcional – OH.

Exemplos

$$CH_3 - CH_2$$
 Etanol
|
OH

Para os álcoois de cadeias carbônicas com 3 ou mais carbonos, devemos indicar a posição do – OH, numerando a cadeia carbônica a partir da extremidade mais próxima do grupo funcional.

Exemplo

OH
$${}^{4}CH_{3} - {}^{3}CH_{2} - {}^{2}CH - {}^{1}CH_{3}$$
 2 - butanol

Quando o álcool for ramificado, a cadeia principal é aquela que apresenta o maior número de carbonos possível e que contenha o grupo funcional – OH.

Exemplo



2 - metil - clicloexanol

Quando encontramos mais de um grupo – OH na cadeia, a terminação deve ser precedida pelos prefixos DI, TRI, etc.

Exemplos

ОН ОН CH ₂ —CH ₂	$\begin{array}{c} \text{OH} \text{OH} \text{OH} \\ \text{I} \text{I} \text{I} \\ \text{CH}_2 - \text{CH} - \text{CH}_2 \end{array}$
Etanodiol	Propanotriol
(glicol)	(glicerina)

Para moléculas mais complexas, consideramos a hidroxila como uma ramificação chamada de hidróxi.



3-cloro-1-fenil-2-hidróxipentano

Observações

1. Para a numeração das cadeias carbônicas dos álcoois deve-se iniciar pela extremidade mais próxima da característica mais importante dos compostos, na ordem:

Grupo Funcional > Insaturação > Radical Exemplo

$$CH_{5} - CH_{4} = CH_{3} - CH_{2} - CH_{1} + CH_{2}$$

3-penten-1-OL

2. Quando a hidroxila estiver ligada diretamente ao carbono insaturado (de dupla), não será álcool e sim **ENOL**, um composto altamente instável.

5.2. Nomenciatura Usuai

Iniciamos com a palavra **álcool** seguida do nome do radical ligado à hidroxila com a terminação **ico**.

Exemplos

CH₃OH Álcool metílico

$$\begin{array}{c} & \text{OH} \\ \text{I} \\ \text{CH}_3 - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 \\ \text{Álcool n-propílico} \end{array}$$

5.3. Nomenciatura de Kolbe

Kolbe apresentou uma nomenclatura que considera os álcoois derivados do metanol, ao qual deu o nome de carbinol.

$$H = H = H = H = H$$

$$H = H$$



PV2D-06-QUI-51

5.4. Classificação dos Álcoois

Quanto à posição do grupo - OH

Álcool primário: quando a hidroxila (–OH) está ligada a um átomo de carbono primário.

Exemplo

Álcool secundário: quando a hidroxila (–OH) está ligada a um átomo de carbono secundário.

Exemplo

$$CH_3 - CH - CH_3$$

Exemplo

$$\begin{array}{c} & \text{OH} \\ \text{I} \\ \text{CH}_3 - & \text{C} - & \text{CH}_3 \\ & \text{I} \\ & \text{CH}_3 \end{array}$$

Observação – Não existe álcool quaternário devido à tetravalência do carbono. Porém, existe álcool com carbono quaternário na molécula.

Exemplo

$$\begin{array}{ccc} CH_3 & OH \\ I & I \\ CH_3 - C - CH_2 - CH_2 \\ I \\ CH_3 \end{array}$$

Quanto ao número de hidroxilas

Monoálcool: possui um só grupo funcional-OH.

Exemplo

$$\begin{array}{c} & \text{OH} \\ I \\ \text{CH}_3 - \text{CH}_2 \end{array}$$

Diálcool: possui dois grupos funcionais-OH.

Capítulo 03. Nomenciatura



Exemplo

 $\begin{array}{cc} OH & OH \\ I & I \\ CH_2 - CH_2 \end{array}$

Triálcool: possui três grupos funcionais – OH. **Exemplo**

$$\begin{array}{ccc} \mathrm{OH} & \mathrm{OH} & \mathrm{OH} \\ \mathrm{I} & \mathrm{I} & \mathrm{I} \\ \mathrm{CH}_2 - \mathrm{CH} - \mathrm{CH}_2 \end{array}$$

Observação – Para os poliálcoois, as hidroxilas são encontradas em carbonos distintos.

6. Fenol

São compostos que apresentam pelo menos um –OH ligado diretamente ao núcleo benzênico.

Exemplo



Nomenclatura IUPAC

É utilizado o prefixo **hidróxi**, seguido da terminação **benzeno**. Caso existam ramificações no núcleo benzênico, a numeração inicia-se na hidroxila e segue o sentido dos menores números.

Exemplos



hidróxi-benzeno



1-hidróxi - 2-metilbenzeno ou o-hidróxi-metilbenzeno

Capítulo 03. Nomenciatura



1,3-diidróxi-benzeno ou m-diidróxi-benzeno



1-hidróxi-naftaleno ou α-hidróxi-naftaleno ou α-naftol



2-hidróxi-naftaleno ou β-hidróxi-naftaleno ou β-naftol

Observação



Este composto não é fenol e sim álcool, pois o grupo – OH encontra-se ligado a carbono fora do anel benzênico. O composto é denominado fenil–metanol.

7. Aldeído

São compostos que apresentam o grupo



Exemplos



7.1. Nomenciatura IUPAC

A terminação é al. A cadeia principal deve ser a mais longa possível que apresentar o grupo funcional. Para cadeias ramificadas, devemos numerar pela extremidade que contenha o grupo funcional.





Metanal

Etanal



3-metil-butanal





Propenal





2, 4-pentadienal

7.2. Nomenciatura Usuai

Os aldeídos recebem o nome dos ácidos carboxílicos que eles dão origem.



8. Cetona

São compostos que apresentam o grupo carbonila entre dois grupos orgânicos.

Exemplos



8.1. Nomenciatura IUPAC

A terminação é ona. A cadeia principal é a mais longa que possui a carbonila e a numeração é feita a partir da extremidade mais próxima da carbonila.

$$CH_{3} - C - CH_{3}$$
 $CH_{3} - C - CH_{2} - CH_{2} - CH_{2} - CH_{2} - CH_{2} - CH_{3}$

Propanona

2-pentanona



4–metil–2–pentanona

fenil-etanona

CH₃-C-C-CH₃

$$CH_3 - C - C - CH_2 - CH_3$$

Butanodiona

-pentanodiona

Capítulo 03. Nomenclatura



PV2D-06-QUI-51

8.2. Nomenciatura Usuai

Menciona-se o radical menor, o radical maior, ligados ao grupo carbonila, seguido da terminação cetona.

Exemplos



 $CH_3 - C - CH_2 - CH_3$

Metil-etil-cetona

9. Ácido Carboxílico

São compostos que apresentam pelo menos um grupo carboxila (carbonila + hidroxila).

Exemplos



9.1. Nomenciatura IUPAC

A terminação utilizada é óico. A cadeia principal é a mais longa que possui a carboxila. Para cadeias ramificadas, devemos numerar a partir do carbono da carboxila.

Exemplos





Ácido metanóico

Ácido etanóico



Ácido 3-metil-butanóico





Ácido etanodióico

Observação - Podem ser usadas também as letras gregas ao invés dos números; o primeiro carbono após a carboxila recebe a letra α.

$$\overset{\gamma}{\overset{}_{CH_{3}}-\overset{\beta}{\overset{}_{CH}-\overset{\alpha}{\overset{}_{CH_{2}}-\overset{\alpha}{\overset{}_{CH}-\overset{\alpha}{\overset{}$$

Ácido β-metil butanóico

9.2. Nomenciatura Usual

O nome usual para os ácidos é associado à sua origem ou a suas propriedades.



Ácido fórmico Ácido acético

Ácido butírico



Ácido oxálico



Ácido benzóico

Observação – Ácidos carboxílicos de cadeia longa, com mais de 10 carbonos na cadeia principal, são denominados de ácidos graxos. São constituintes de óleos e gorduras animais e vegetais.

$$H_3C - (CH_2)_7 - CH = CH - (CH_2)_7 - C$$

Ácido oléico

Ácido palmítico

10. Éter

São compostos em que o oxigênio está ligado a dois radicais orgânicos. Podem ser considerados como derivados da água, pela substituição dos dois átomos de hidrogênio por dois radicais orgânicos. Seu grupo funcional é uma ponte de oxigênio (oxi-ponte), ligando duas cadeias carbônicas; por isso, também são chamados óxidos orgânicos.

Tem fórmula geral R - O - R ou R - O - Ar ou Ar - O - Ar, podendo os radicais serem ou não iguais entre si.

Se os dois radicais ligados ao oxigênio forem iguais, teremos éteres simétricos; caso contrário, éteres assimétricos. Os éteres são obtidos a partir da desidratação intermolecular dos álcoois.

Exemplos

10.1. Nomenclatura IUPAC

O menor grupo é acompanhado da terminação **óxi**, seguido do nome do hidrocarboneto correspondente ao grupo maior.

Exemplos

 $CH_3 - O - CH_3$

CH₃-O-CH₂-CH₃

Metóxi-metano

Metóxi–etano

Etóxi-benzeno

$$CH_3 - O - \stackrel{2}{C}H - \stackrel{3}{C}H_2 - \stackrel{4}{C}H_3$$

2-metóxi-butano

10.2. Nomenclatura Usual

A palavra éter é seguida do radical menor, radical maior acompanhado da terminação **ílico**.

 $CH_3 - O - CH_3$ Éter (di) metílico

$$CH_3 - CH_2 - O - CH_2 - CH_3$$

Éter (di) etílico (éter comum ou éter sulfúrico)

Éter metil-fenílico (anisol)

Observação – Há dois tipos de éteres cíclicos:

 a) Os que possuem o oxigênio ligado a dois carbonos vizinhos são denominados epóxidos.

$$H_2C - C - C - C - CH_3$$

Epoxi–butano

b) Os que possuem o oxigênio ligado a dois carbonos que não sejam vizinhos.

A nomenclatura deste tipo de éter cíclico não segue nenhum sistema regular (nomenclatura usual).



Tetra-hidrofurano



28

11. Éster

São compostos derivados dos ácidos carboxílicos. Apresentam fórmula geral:

$$R-C$$
 em que R e R' são radicais

alquil, alquenil, arila, etc., iguais ou diferentes.

Os ésteres possuem aroma bastante agradável. São usados como essência de frutas e aromatizantes nas indústrias alimentícia, farmacêutica e cosmética. Constituem também óleos vegetais e animais, ceras e gordura.

Nomenclatura IUPAC

Colocando-se o grupo funcional como referencial, podemos dividir o nome em duas partes:

Prefixo + Saturação + oato de + Nome do radical

metanoato de metila (formiato de metila)



etanoato de metila (acetato de metila)



propanoato de fenila

$$H-C O-C^{H_2}-CH_3$$

O éster acima, o metanoato de etila, é usado como essência artificial de rum e groselha.



O éster acima, o acetato de etila, é usado como essência de maçã, pêssego e framboesa.

12. Sal de Ácido Carboxílico

São compostos que derivam dos ácidos carboxílicos pela substituição do hidrogênio da hidroxila (- OH) por metal.



Nomenciatura IUPAC

Dá-se o sufixo-ATO ao nome da cadeia de origem (igual aos ésteres), seguido da preposição de e o nome do metal.





etanoato de sódio acetato de sódio

propanoato de potássio

Como todos os sais, são sólidos cristalinos e não voláteis. Sais de ácidos carboxílicos de cadeia longa (ácidos graxos) são denominados de sabões.

Capítulo 03. Nomenclatura

13. Haleto de Ácido

São compostos orgânicos que derivam dos ácidos carboxílicos por substituição do grupo hidroxila por halogênio.



x = Cl, Br, I.

Dos haletos de ácidos, os mais importantes são os que possuem o grupo cloro, denominados cloretos de ácidos.

Nomenciatura IUPAC

Usa-se a palavra **cloreto**, a preposição **de** e a seguir o prefixo + saturação + OILA.



cloreto de etanoíla cloreto de acetila

cloreto de propanoíla cloreto de propionila

14. Anidrido

São derivados dos ácidos carboxílicos, que resultam da desidratação dos ácidos. Apresentam a fórmula geral:

$$\begin{array}{c} O & O \\ \parallel & \parallel \\ R - C - O - C - R' \end{array}$$

Obs.-Podemos substituir R-e R'- por Ar-

Nomenciatura IUPAC

O nome do anidrido é igual ao nome do ácido que lhe deu origem, precedido do termo **anidrido**. Quando o anidrido é formado por ácidos diferentes, devemos citar primeiro o nome do ácido de menor cadeia carbônica.

$$\begin{array}{c} O & O \\ \parallel & \parallel \\ CH_3 - C - O - C - CH_3 \end{array}$$

anidrido etanóico (anidrido acético)

anidrido etanóico-propanóico

$$\begin{array}{c} O & O \\ CH_3-CH_2-C-O-C & -CH-CH_2-CH_2-CH_3 \\ I \\ CH_3 \end{array}$$

anidrido propanóico-2-metil-pentanóico

15. Aminas

Podem ser consideradas como sendo derivadas do NH_3 pela substituição de um, dois ou três hidrogênios por radicais alquila ou arila (aromáticos). Dessa forma, surge a classificação de amina primária, secundária e terciária.

Fórmula geral:

$$R - NH_2$$

Amina primária

Amina secundária

$$R - N - R$$

 $|$
 R'

Amina terciária

30

PV2D-06-QUI-51

Nomenclatura IUPAC

São citados os nomes dos grupos substituintes em ordem alfabética, seguidos da terminação **amina.**

$$CH_3 - NH_2$$

metilamina

$$CH_3 - NH - CH_2 - CH_3$$

etil-metilamina



16. Amidas

Podem ser consideradas como derivadas do NH₃ pela substituição de um, dois ou três

hidrogênios pelos radicais acila (R – C).

$$CH_3 - CH_2 - N - CH_2 - CH_2 - CH_3$$

 \downarrow
 CH_3

etil-metil-propil-amina

As aminas aromáticas nas quais o nitrogênio se liga diretamente ao anel benzênico $Ar-NH_2$ são, geralmente, nomeadas como se fossem derivadas da amina aromática mais simples: a Anilina (fenilamina).



Fenil-metilamina N-metilamina-benzeno N-metilanilina

Para aminas mais complexas, consideramos o grupo NH_2 como sendo uma ramificação, chamada de **amino.**



2-amino-4-fenil-2, 3-dimetilhexano



Amida primária



Amida secundária



Amida terciária

Nomenciatura IUPAC

Prefixo + saturação + amida





fenil-metanamida

$$CH_3 - C$$

NH - CH₃

N-metil-etanamida



etanodiamida



17. Nitrilas

Apresentam o grupo funcional $R - C \equiv N \text{ ou } Ar - C \equiv N \cdot O \text{ próprio } H - C \equiv N$ pode ser considerado uma nitrila.

O grupo − C \equiv N pode ser representado por − CN.

17.1. Nomenciatura IUPAC

É dado nome ao hidrocarboneto correspondente seguido da terminação **nitrila**.

> $H - C \equiv N$ metanonitrila

 $CH_3 - C \equiv N$ etanonitrila

 $CH_3 - CH_2 - C \equiv N$ propanonitrila

17.2. Nomenclatura Usual

Usa-se a palavra cianeto e, em seguida, o nome do radical preso ao grupo – $C \equiv N$.

¢ cianeto de etila

A nitrila mais importante é o propenonitrila (acrilonitrila).

$$H_{2}C = C - C \equiv N$$

18. Nitro Composto

Podem se considerados como derivados

do ácido nítrico
$$\begin{pmatrix} H - O - N \\ & O \end{pmatrix}$$
 pela

substituição do - OH por um radical alquil ou aril; por isso, tem fórmula geral

$$R - N$$
 ou $Ar - N$ O grupo funci-

onal é o grupo Nitro
$$\rightarrow - N^{0}$$
 ou $-NO_{2}$

Nomenclatura Oficial

Usa-se prefixo **nitro** antecedendo o nome do hidrocarboneto de que se origina o nitro composto.

Exemplo

$$H_3C - NO_2$$

nitrometano

Capítulo 03. Nomenciatura

PV2D-06-QUI-51



2-nitropentano



2, 4, 6-trinitrotolueno



2, 4, 6 trinitrofenol

19. Haletos Orgânicos

São compostos derivados dos hidrocarbonetos pela substituição de pelo menos um hidrogênio pelo halogênio. (F, Cl, Br, I).

Exemplos

19.1. Nomenciatura IUPAC

O halogênio é considerado como sendo uma ramificação presa à cadeia principal. O nome do halogênio antecede o do hidrocarboneto.

Exemplos

$$\begin{array}{c}
 Br \\
 H_3 - CH - CH_3 \\
 2-bromopropano
\end{array}$$

Capítulo 03. Nomenclatura

$$\overset{1}{C}H_{3} - \overset{2}{C}H - \overset{3}{C}H - \overset{4}{C}H_{3}$$
$$\overset{I}{I} \qquad \overset{I}{B}r \qquad I$$





1-bromo - 2-fluorbenzeno ou orto-bromo-fluorbenzeno

Quando a cadeia principal possuir halogênios e radicais alquílicos, numere a cadeia pela extremidade mais próxima de um dos grupos substituintes, seguindo a regra dos menores números. Se dois substituintes estão em igual distância das extremidades da cadeia, numere-a a partir do substituinte, considerando sua ordem alfabética.

Exemplos

$$CH_{3} - CH_{-1} - CH_{-$$

2-cloro - 3-metilpentano

$$\begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 4 & 2 \end{bmatrix} \xrightarrow{6} CH_2 - CH_3$$

1-bromo - 2-etil-benzeno ou orto-bromo-Etil-benzeno

19.2. Nomenclatura Usual

São utilizados os termos **cloreto**, **brometo** e **iodeto**, antecedendo o nome do radical orgânico.

Exemplos

CH₃Cl cloreto de metila

PV2D-06-QUI-51





brometo de fenila

São encontrados haletos com nomes usuais conhecidos no comércio:

CHCl₃ CHBr₃ clorofórmio bromofórmio

> CHl₃ iodofórmio

Podemos citar o gás freon, usado na refrigeração e o gás propelente, em, aerossóis.

$$Cl - C - F$$

dicloro-difluormetano (Freon ou C.F.C)

Também o DDT que foi usado como inseticida.



diclorodifenil - tricloetano (D. D. T.)

Capítulo 04. Isomeria

Isomeria é o fenômeno que consiste em dois ou mais compostos químicos diferentes apresentarem a mesma fórmula molecular (mesma quantidade de átomos) e fórmulas estruturais diferentes. Estes compostos são denominados **isômeros** (*iso* = mesmo e *meros* = partes).

Os isômeros apresentam sempre propriedades físicas diferentes, podendo apresentar ou não propriedades químicas diferentes.

As propriedades, em geral, são diferentes, porque as distribuições atômicas nas moléculas são diferentes.

Exemplo

Com a fórmula molecular C_2H_6O existem dois compostos diferentes.



Portanto

Isômeros \rightarrow são aqueles compostos que possuem mesma fórmula molecular e diferentes fórmulas estruturais.

1. Isomeria Plana

É o caso de isomeria em que os isômeros podem ser diferenciados pelas suas fórmulas estruturais planas.

1.1. Isomeria de Função ou Isomeria Funcional

São compostos que apresentam a mesma fórmula molecular e diferentes fórmulas estruturais e pertencem a **funções diferentes**.



1.2. Isomeria de Cadeia

São compostos de mesma fórmula molecular e fórmulas estruturais diferentes que pertencem à mesma função, porém diferem entre si pelo tipo de cadeia carbônica.

Exemplos

$$\overbrace{H_{3}C-CH_{2}-CH_{2}-CH_{3}}^{C_{4}H_{10}}$$
Butano
Cadeia normal

Capítulo 04. Isomeria

$$\begin{array}{c} C_4H_{10} \\ H_3C - CH - CH_3 \\ \\ \\ CH_3 \\ \\ \\ Metil \text{ propano} \\ \\ Cadeia \text{ ramificada} \end{array}$$

$$\overbrace{\begin{array}{c} C_4H_8\\ H_2C - CH_2\\ | & |\\ H_2C - CH_2\\ \hline \\ Ciclo butano\\ \hline \\ Cadeia fechada \end{array}}$$

$$C_4H_8$$

$$H_3C - CH = CH - CH_3$$
2-buteno
Cadeia aberta

$$\underbrace{\begin{array}{c} C_2H_7N \\ H_3C - N - CH_3 \\ H \\ H \end{array}}_{H}$$

Dimetil amina Cadeia heterogênea

$$C_2H_7N$$

H₃C – CH₂ – NH₂ Etil amina Cadeia homogênea

1.3. Isomeria de Posição

É o caso de isomeria plana em que os isômeros são da mesma função química, apresentam o mesmo tipo de cadeia, porém diferem na posição de um grupo funcional, radical ou uma insaturação.

Exemplo 1 \rightarrow Diferem pela posição de radical.

$$\overbrace{\begin{array}{c} C_6H_{14} \\ H_{3}C - C \\ I \\ CH_3 \end{array}}^{C_6H_{14}} CH_2 - CH_2 - CH_3$$

2-metil pentano

$$\overbrace{\begin{array}{c} C_{6}H_{14} \\ H_{3}C - CH_{2} - CH_{2} - CH_{2} - CH_{3} \\ H_{3}C - CH_{2} - CH_{3} \\ H_{3}C - CH_{2} - CH_{3} \\ H_{3}C - CH_{3} \\ H_{3} \\ H_$$

3-metil pentano

Exemplo 2 \rightarrow Diferem pela posição do grupo funcional.

$$\underbrace{\begin{array}{c} C_{4}H_{10}O \\ OH \\ H_{3}C - CH_{2} - CH_{2} - CH_{2} \\ 1 \text{-butanol} \end{array}}_{I \text{-butanol}}$$

$$\begin{array}{c}
C_{4}H_{10}O \\
OH \\
H_{3}C - CH_{2} - CH - CH_{3} \\
2-butanol
\end{array}$$

Capítulo 04. Isomeria

Exemplo $3 \rightarrow$ Diferem pela posição de insaturação.

$$\overbrace{H_2C = CH - CH_2 - CH_3}^{C_4H_8}$$

1-buteno

$$\underbrace{\frac{C_4H_8}{H_3C - CH = CH - CH_3}}_{H_3C}$$

2-buteno

1.4. Isomeria de Compensação ou Metameria

É o caso de isomeria plana em que os isômeros são da mesma função química, apresentam cadeias heterogêneas e diferem entre si pela posição do heteroátomo na cadeia.

Exemplo

$$\overbrace{H_3C - O - CH_2 - CH_2 - CH_3}^{C_4H_{10}O}$$

Metóxi-propano

$$\underbrace{\begin{array}{c} C_4H_{10}O\\ H_3C-CH_2-O-CH_2-CH_3\end{array}}_{H_3C-CH_2-O-CH_2-CH_3}$$

Etóxi-etano



Etanoato de metila

$$H - C$$
 $O - CH_2 - CH_3$
Metanoato de etila

1.5. Tautomeria ou Isomeria Dinâmica

É um caso particular de isomeria funcional em que dois ou mais isômeros coexistem em equilíbrio dinâmico em solução, transformando-se um no outro, pela mudança de posição de H na molécula.

A tautomeria também pode ser denominada ceto-enólica ou aldo-enólica, pois ocorre principalmente entre cetonas e enóis ou aldeídos e enóis.

Enol é todo composto que apresenta hidroxila (– OH) em carbono de dupla ligação.

Exemplo



Etanal





2. Isomeria Espacial

É o caso de isomeria em que a diferença entre os isômeros só pode ser verificada mediante o uso de fórmulas espaciais.

Temos dois tipos de isomeria espacial: **ge-ométrica** e **óptica**.

2.1. Isomeria Geométrica ou Cis-Trans

I. Isomeria geométrica em compostos de cadeia aberta com dupla ligação

Para que haja esse tipo de isomeria, os compostos deverão ter ligantes diferentes presos a cada carbono da dupla ligação.

$$(\widetilde{\underline{H}_{3}}\widetilde{\underline{C}}) - \underbrace{\begin{array}{c} C = C - [CH_{3}] \\ [H] & [H] \\ [H] & [H] \end{array} }$$

2-buteno (tem isomeria geométrica)

$$H_{3}C - C - C = C - H_{1}$$

$$H_{2} + H_{1}$$

1-buteno (não tem isomeria geométrica)

$$(\widehat{\underline{H}}) - \underline{C} = \underline{C} - [\underline{H}]$$

1,2 dicloroeteno (tem isomeria geométrica)

$$(\widehat{\underline{C}}) - \underline{C} = \underline{C} - [\underline{H}]$$

1,1 dicloroeteno (não tem isomeria geométrica)

Sempre que tivermos satisfeita a condição para existência deste tipo de isomeria, devemos concluir pela existência de dois isômeros:

O isômero **cis**, que espacialmente nos mostra radicais maiores do mesmo lado do plano estabelecido pela dupla ligação, e o isômero **trans**, em que os radicais maiores estão em lado contrário em relação ao referido plano.









Os isômeros geométricos ou cis-trans diferem entre si pelas suas propriedades físicas (PE, PF, densidade, solubilidade etc.) e em certas propriedades químicas.

No que diz respeito às propriedades químicas, os isômeros geométricos podem apresentar ou não diferenças.

Exemplo



Ácido butenodióico



Ácido butenodióico - cis Ácido maleico

Capítulo 04. Isomeria

38

PV2D-06-QUI-51





Ácido butenodióico - trans Ácido fumárico

Observação – se aquecermos o ácido maleico, obteremos facilmente o respectivo anidrido.



Ácido maleico Anidrido maleico O mesmo não acontece com o ácido fumárico, o que pode ser entendido especialmente pela distância entre as carboxilas.



Ácido fumárico (trans)

II. Isomeria geométrica em compostos de cadeias fechadas

Para que haja este tipo de isomeria, os compostos deverão apresentar pelo menos dois carbonos do ciclo, contendo ligantes diferentes.

Exemplo



1, 2 dicloro-ciclopropano

Apresenta isomeria geométrica.

Capítulo 04. Isomeria



1 cloro ciclopropano

Não apresenta isomeria geométrica.

Este caso de isomeria também é chamado de isomeria bayeriana e a verificação dos isômeros sempre é feita em relação ao plano determinado pelo ciclo.

Sendo assim, o isômero **cis** será aquele que apresentar ligantes iguais do mesmo lado do plano do ciclo e o isômero **trans**, quando tais ligantes estiverem em lados opostos em relação ao plano do ciclo.

Exemplo



1,2 dicloro-ciclopropano

Podemos representar as seguintes estruturas:



cis - 1,2-dicloro-ciclopropano



trans - 1,2-dicloro-ciclopropano

Isomeria geométrica no 1,2-dimetil-ciclopentano



cis - 1,2-dimetil-ciclopentano



trans - 1,2-dimetil-ciclopentano

Propriedades Físicas dos Isômeros

Nome	PF (°C)	PE (°C)	Densidade
cis - 1,2-dimetil- ciclopentano	- 62	99	0,772
trans - 1,2-dimetil- ciclopentano	- 120	92	0,750

Observe que os compostos isômeros espaciais apresentam propriedades físicas diferentes, mesmo apresentando estruturas planas iguais.

2.2. Isomeria Óptica

A luz natural é uma modalidade de energia radiante. Na luz natural, as vibrações ocorrem em todos os planos que contêm o eixo x, y; este representa a direção de propagação do raio luminoso.



Se fosse possível observar os planos de vibração da luz natural, teríamos esquematicamente o seguinte:



em que aa_1 , bb_1 , cc_1 , dd_1 seriam os planos de vibração da luz natural "vistos de frente".

Luz polarizada é a luz cujas ondas vibram em um único plano (aa_1 , ou bb_1 , ou cc_1 , ou dd_1) ou qualquer outro plano não representado na figura.

Existem certas substâncias que, quando atravessadas pela luz natural, absorvem as ondas que vibram em todos os planos com exceção das de um.

Tais substâncias transformam a luz natural em luz polarizada e serão denominadas polarizadoras.

Na prática, o polarizador mais usado é o prisma de Nicol, prisma este construído colocando-se dois cristais de calcita "com bálsamo-do-canadá."

Esquematicamente, temos:



PV2D-06-QUI-51

Os compostos que apresentam isomeria óptica desviam o plano da luz polarizada devido a uma assimetria molecular. O polarímetro é o aparelho utilizado na determinação da atividade óptica das substâncias opticamente ativas. Esquematizamente, podemos encontrar:



Quando a luz atravessa a solução sem sofrer desvio, a substância é opticamente inativa. Quando a luz atravessa a solução e sofre desvio, a substância é opticamente ativa e apresenta isometria óptica. Se o desvio foi à direita, o isômero é chamado de dextrogiro; se o desvio foi à esquerda, o isômero é chamado de levogiro.

A assimetria molecular é encontrada em moléculas que apresentam carbono quiral.

Carbono quiral (C *) é aquele que se liga a quatro átomos ou radicais diferentes entre si.



I. Isomeria Óptica com 1 Carbono Quiral



Todo composto que apresenta um carbono quiral na molécula será representado sempre por dois isômeros opticamente ativos: um dextrogiro e outro levogiro, cujas moléculas funcionam como objeto e imagem em relação a um espelho plano.



A todo isômero dextrogiro corresponde um levogiro, os dois desviam o plano de vibração da luz polarizada do mesmo ângulo para lados opostos. Assim, o primeiro desviará de + α e, o segundo, de – α . Os isômeros que são imagem um do outro num espelho plano denominam-se enantiômeros.

As moléculas que não se podem sobrepor às respectivas imagens num espelho plano são denominadas de quirais (antigamente denominadas de assimétricas). Portanto, num composto cujas moléculas são quirais, encontramos moléculas dextrogiras e levogiras (enantiômeros).

Se misturarmos quantidades iguais de enantiômeros, obteremos o racêmico, que é opticamente inativo (inativo por compensação externa).

Capítulo 04. Isomeria

Observação

Uma substância opticamente inativa não desvia o plano da luz polarizada.

Outros exemplos de compostos que apresentam um carbono quiral na molécula e que, por isso, são representados por enantiômeros e por racêmico.

$$\begin{array}{ccc} H & OH \\ H_3C - \overset{I}{C} - \overset{I}{C} \overset{I}{C}^* - CH_3 \\ & \overset{I}{H} & \overset{I}{H} \end{array}$$



$$H_{3}C - C_{I}^{I} + C_{H_{2}}^{I} - C_{H_{2$$

1 cloro-2-aminopropano

II. Isomeria Óptica Com 2 Carbonos Quirais Diferentes

Exemplo

$$\begin{array}{ccc} OH & Cl \\ I & I \\ H_{3}C - C^{*} - C^{*} - CH_{3} \\ I & I \\ H & H \end{array}$$

Os carbonos de números 2 e 3 são quirais e diferentes, pois um está ligado a – OH e, outro, ao – Cl.

Os ângulos de desvio produzidos por eles serão, portanto, diferentes.

Suponhamos que um seja responsável por um desvio α e, outro, por β e convencionemos, por exemplo:



Se representarmos por sinas + e – os desvios para a direita e para a esquerda, respectivamente, teremos os seguintes isômeros possíveis:

$$\begin{array}{c}
\boxed{I} + \alpha \\
+ \beta \\
+ (\alpha + \beta) \\
d_1
\end{array}$$

$$\begin{array}{c}
\boxed{II} - \alpha \\
- \beta \\
- (\alpha + \beta) \\
l_1
\end{array}$$

$$(II) + \alpha \qquad (IV) - \alpha - \beta + (\alpha - \beta) \qquad (IV) - \alpha - (\alpha - \beta) d_2 \qquad l_2$$

Se misturarmos quantidades iguais dos enantiômeros $d_1 e l_1$, teremos o racêmico r_1 .

Se fizermos o mesmo para os isômeros d $_2$ e l $_2$, teremos o racêmico r $_2$.

Outros exemplos de compostos com dois carbonos quirais diferentes:

$$\begin{array}{c} O & OH & NH_2 \\ C & -C^* - C^* - C^* - C^* \\ HO & H & H \end{array} \begin{array}{c} O \\ OH \end{array}$$

Ácido - 2-hidróxi-3-aminobutanodióico

$$H - \begin{array}{c} OH & OH & OH \\ - C & -C^* - C^* - C^* - C^* \\ - & - & - & - \\ H & H & H \end{array} O \\ OH$$

Aldotetrose (açúcar)

III. Isometria Óptica Com n Carbonos Quirais Diferentes

	nº de isômeros opticamente ativos	nº de misturas racêmicas
1C*	2 (d, l)	$1r = \frac{2}{2}$
$2C^* \neq S$	$\frac{4}{2^2}$ (d ₁ , d ₂ , l ₁ , l ₂)	$2 (r_1 e r_2) = \frac{2^2}{2}$
3C [*] ≠S	$\frac{8}{2^3} \begin{pmatrix} l_1 \ , \ l_2 \ , \ l_3 \ , \ l_4 \\ d_1 \ , \ d_2 \ , \ d_3 \ , \ d_4 \end{pmatrix}$	4 (r ₁ , r ₂ , r ₃ , r ₄) = $\frac{2^3}{2}$
$nC^* \neq S$	2 ⁿ	$\frac{2^n}{2}$

Fórmulas de Van't Hoff

nº de isômeros opticamente ativos = 2ⁿ

 n° de racêmicos = $\frac{2^{n}}{2}$

IV. Isomeria óptica, com dois carbonos quirais iguais

Seja, por exemplo, o composto:



Ácido tartárico

Os carbonos de números 2 e 3 são quirais, porém iguais. Se considerarmos, portanto, que um deles é responsável por um desvio α do plano de vibração da luz polarizada, o outro também o será.

O número de isômeros possíveis será o seguinte:

(I) + α	11111	$(II) - \alpha$	$(III) + \alpha$
$+ \alpha$	111	-α	-α
+ 2α		-2α	0
d	111	1	meso

r = d + l (em quantidades iguais)

Conclusão

Toda fórmula que apresente dois carbonos quirais iguais será responsável por quatro possibilidades, sendo duas substâncias opticamente ativas, **uma substância opticamente inativa** e **uma mistura racêmica**.

Assim, para o ácido tartárico, as quatro possibilidades são as seguintes:

I) ácido tartárico dextrogiro.

II) ácido tartárico levogiro.

III) ácido mesotartárico ou ácido tartárico inativo por compensação interna.

IV) ácido tartárico racêmico ou ácido tartárico inativo por compensação externa.

Outros exemplos de compostos com dois carbonos quirais iguais:

$$\begin{array}{ccc} OH & OH \\ {}^{|}_{3}C - C^{*} - C^{*} - C^{*} \\ {}^{|}_{1} & {}^{|}_{1} \\ H & H \end{array}$$

$$\begin{array}{cccc} & & & & & & \\ & & & & & \\ H_{3}C - & C^{*} - & C - & C^{*} & - & CH_{3} \\ & & & & & \\ H & & H & H \end{array}$$

3-cloro-2,4-diaminopentano

V. Isomeria óptica em compostos cíclicos

A isomeria óptica também é observada em compostos cíclicos, embora estes não apresentem carbono quiral. Para que a quantidade de isômeros possa ser determinada, devemos considerar a existência do carbono quiral.

O composto cíclico que apresenta assimetria molecular deve possuir carbono com ligantes diferentes. Consideremos o composto 2-metil-1-cloro-ciclopropano.



Observamos que existem dois carbonos no anel (1 e 2) que podem ser considerados como quirais. A quantidade de isômeros é calculada da seguinte maneira:

Isômeros opticamente ativos: $2^n = 2^2 = 4$ Isômeros opticamente inativos:

$$\frac{2^n}{2} = \frac{2^2}{2} = 2$$

As fórmulas estruturais dos isômeros ficam:

Química Orgânica I



Quando dois carbonos do anel possuem os ligantes iguais entre si, possui assimetria molecular somente a forma trans. Consideremos a substância 1,2 dibromo-ciclopropano.



VI. Compostos com duas duplas ligações

A **isomeria** ótica é observada nos compostos com duas duplas acumuladas, ou seja, no mesmo átomo de carbono. Tais compostos são denominados de alênicos.



a≠b e c≠d

Exemplo



Capítulo 04. Isomeria



