

Introdução à Química Orgânica

Química II



BETTER MINDS
De estudantes para estudantes

Introdução à Química Orgânica



BETTER MINDS
De estudantes para estudantes

2022-2023

1

Introdução à Química Orgânica

Estuda a química dos compostos de carbono. Estes compostos são essenciais à vida:

- ADN
- Proteínas
- Compostos do sangue
- Músculos
- Pele

Associados ao O_2 fornecem a energia que sustenta a vida

Teoria da origem da vida na Terra

Atmosfera primitiva de metano + CO_2 + H_2O + NH_3 + H_2 → ^{amoniaco} or atmosfera

↓ Raios e radiação atravessam a atmosfera formando moléculas simples

↓ A partir destes formam-se espécies altamente reactivas

↓ Combinação destas espécies forma espécies mais complexas como:

aminoácidos
formaldeído
cianeto de hidrogénio
purinas e pirimidinas

↳ Partimos de gases e formamos diversos compostos

2



BETTER MINDS
Instituto para o Pensamento

Atualmente:

Era da Química Orgânica:

- Roupa
- Materiais de construção
- gasolina
- borracha
- plásticos
- medicamentos

• cloro fluorcarbonetos são as maiores responsáveis pela destruição da camada de ozono.

• muito usados como aerossóis gases para refrigeração.

Os compostos orgânicos são também alguns dos problemas atuais:

DDT diclorodifeniltricloroetano → deixou-se de utilizar pois acumula-se nos cadeias alimentares, criando problemas

CFCs (camada de ozono) → composto formado em carbonos que contem flúor e ozono.

A Humanidade usa compostos orgânicos desde tempos imemoriais:

Egípcios – índigo, alizarina como corantes para tecidos

Fenícios – púrpura real era obtida de um molusco.

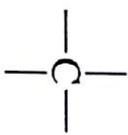
A fermentação das uvas para obter o vinho e as propriedades do vinagre são descritas na Bíblia.

Teoria Estrutural

-Premissas centrais

- Os átomos nos compostos de carbono formam um número fixo de ligações (valência)
- Um átomo de C pode usar mais de uma valência para formar ligações com outros átomos de C (ex: ligações duplas)

Podem-se criar ligações simples ou usar mais do que uma valência para criar ligações duplas.



Carbon atoms are tetravalent



Oxygen atoms are divalent

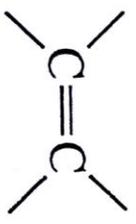


Hydrogen and halogen atoms are monovalent

Carbon-carbon bonds → ligações de carbono



Single bond



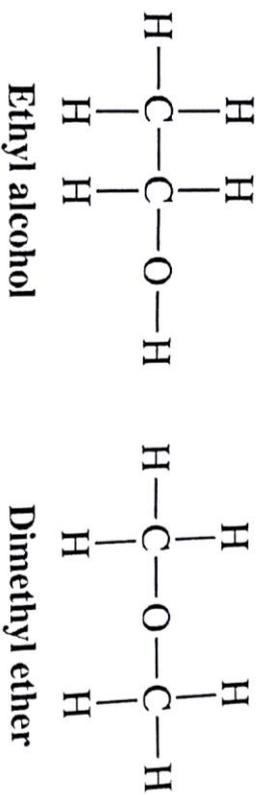
Double bond



Triple bond

Isômeros

- Isômeros são moléculas com a mesma fórmula molecular.
- Existem muitos tipos de isômeros
- Exemplo: C_2H_6O



Isômeros constitucionais - Tem a mesma fórmula molecular mas têm conectividades diferentes. Geralmente diferem nas propriedades físicas.

↪ diferem na forma como os átomos se ligam entre si

	Ethyl Alcohol	Dimethyl Ether
	C_2H_6O	C_2H_6O
← Boiling point ($^{\circ}C$)	78.5	-24.9
← Melting point ($^{\circ}C$)	-117.3	-138

← pontos de ebulição
← ponto de fusão

Electronegatividade

Mede a capacidade de um átomo atrair para si electrões.

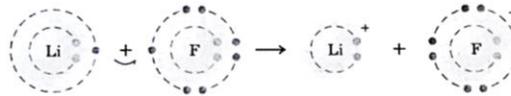
Increasing electronegativity

			H 2.1				
Li 1.0	Be 1.5	B 2.0	C 2.5	N 3.0	O 3.5	F 4.0	
Na 0.9	Mg 1.2	Al 1.5	Si 1.8	P 2.1	S 2.5	Cl 3.0	
K 0.8						Br 2.8	

elemento ⊕ electronegativo
 os e⁻ vão passar ao tempo perto dele
 Increasing electronegativity



Ex de lig iónica:



efeito de transmissão de carga através de uma cadeia de átomos em uma molécula por indução eletrostática.

Efeitos Indutivos

tem a ver com a electronegatividade

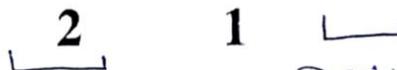
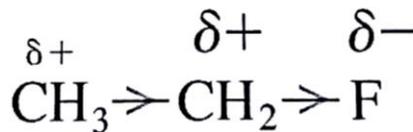
só é visível até 2 ligações.

São os efeitos eletrónicos transmitidos pelo espaço e através das ligações da molécula.



No fluoreto de etilo, o flúor eletronegativo puxa os electrões dos átomos de carbono. → Como o flúor é mais electronegativo vai puxar os electrões do carbono, passando o C a ter um defice de electrões.

Este efeito diminuí com o aumento da cadeia carbonada.



⊕ cadeias carbonadas

⊖ cadeias carbonadas

⊕ efeitos indutivos.

⊖ efeitos indutivos

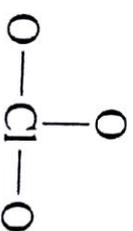
- Exemplo

- Escreva a estrutura de Lewis para o ião clorato (ClO_3^-)
- Calcule o n° total de electrões de valência.

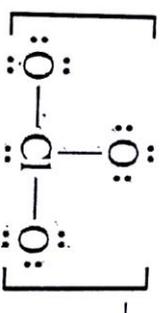
$$7 + 3(6) + 1 = 26$$



- O Cl liga-se aos 3 O por 3 pares de electrões



- Os restantes 20 electrões são distribuídos de forma a satisfazer a regra do octeto.

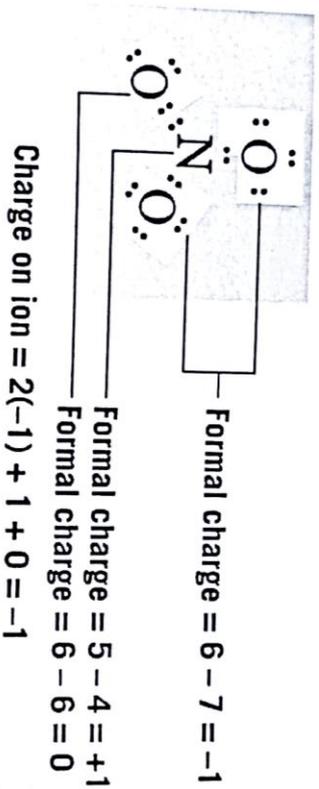


Estruturas de Lewis Rever matéria de Química I

- Os átomos ligam-se usando os electrões de valência.
- Para obter as moléculas os átomos ligam-se através de um determinado n° de electrões.
- Se se forma um ião, electrões são subtraídos ou adicionados para dar a carga correspondente.
- As estruturas devem satisfazer a regra do octeto em todos os átomos de modo a obter-se a estrutura correcta.
- Se necessário utilizam-se ligações múltiplas para satisfazer a regra do octeto.



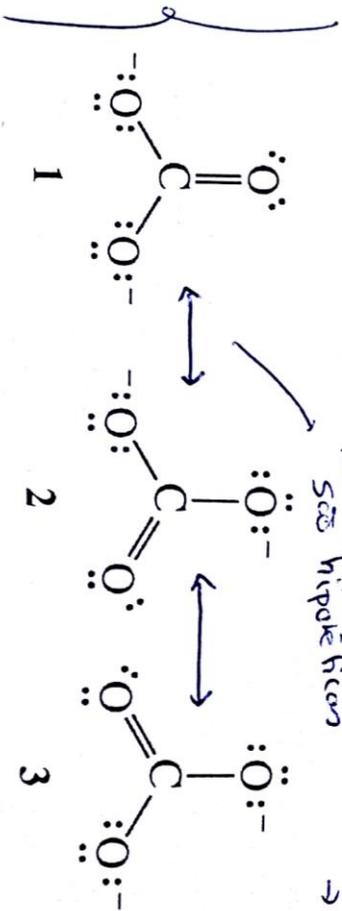
-lão nitrato (NO_3^-)



Ressonância Rever matéria de Química I

Muitas vezes uma única estrutura de Lewis não representa a verdadeira estrutura da molécula: Mais à frente falar-se-á novamente.

Estruturas de Ressonância



indica que elas são híbridas

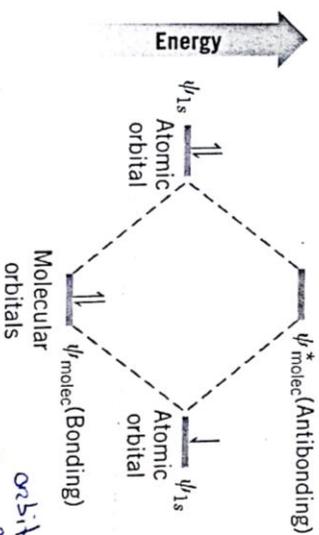
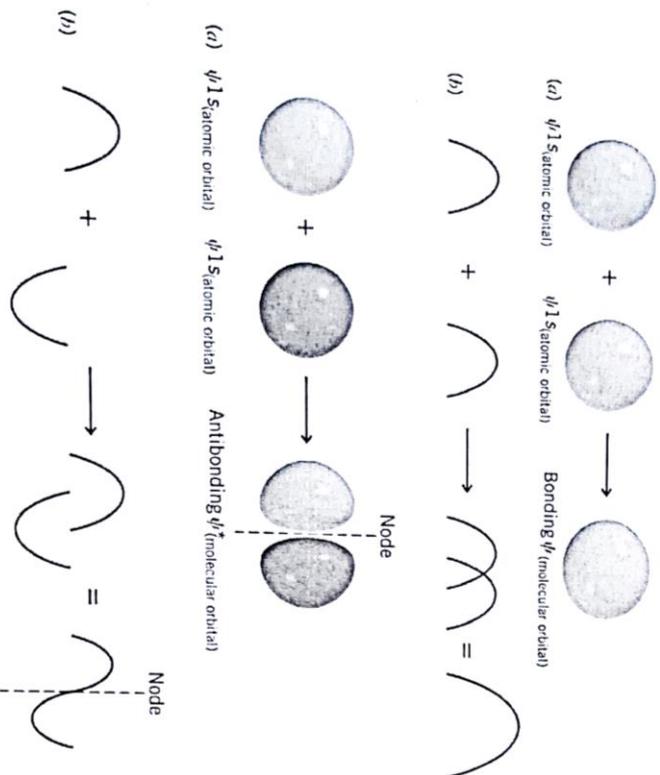
Teoria da Ressonância:

→ sempre que uma molécula ou íon poder ser representada por 2 ou mais estruturas de Lewis, que diferem somente nos parâmetros dos elétrons, nome das estruturas, chamadas estruturas de Ressonância, sendo uma representação correta para a molécula ou íon 16

Orbitais moleculares (OM) Rever matéria Química I

Teoria das Orbitais Moleculares – conforme os átomos se aproximam se coalescem e combinam-se para dar OM que podem conter no máximo 2 electrões. N° de OA = N° de OM. Ver Matéria Química I.

As 2 orbitais formam-se porque as propriedades matemáticas das funções de onda permitem que elas se combinem por adição ou subtração. Assim podem combinar-se em fase ou fora de fase.



orbital molecular ligante

OMI é

A energia dos electrões nas OMI é substancialmente menor que a energia nas OA dos átomos individuais.

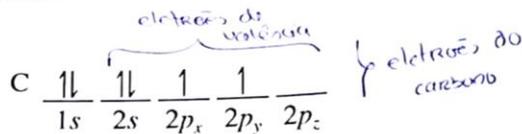
A energia dos electrões nas OMAI é muito maior.

orbital molecular anti-ligante

fundamental em que orbitais atômicos incompletos combinam-se para formar a configuração de um número menor de ligações

Hibridação sp³. A Estrutura do Metano e Etano

A estrutura do **metano** com as suas 4 ligações tetraédricas idênticas não podem ser explicadas adequadamente usando a configuração atômica do C:



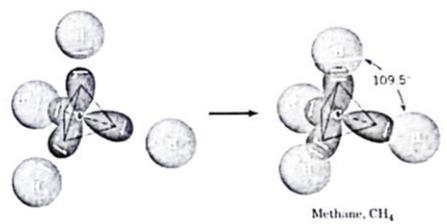
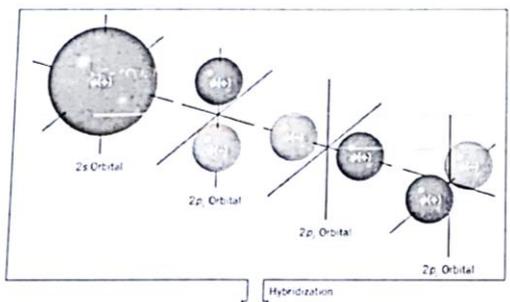
Ground state of a carbon atom

A hibridação das orbitais 2s e 2p fornece 4 novas orbitais idênticas sp³ que podem ser usadas para fazer as ligações no metano.

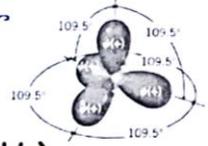
A hibridação é uma combinação matemática das funções de onda da 2s e 2p para obter as funções de onda das novas orbitais



BETTER MINDS
De estudantes para estudantes

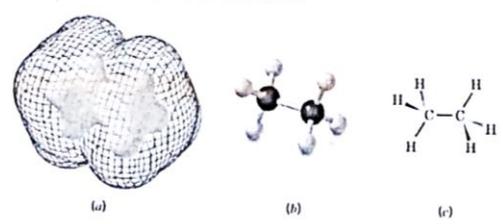
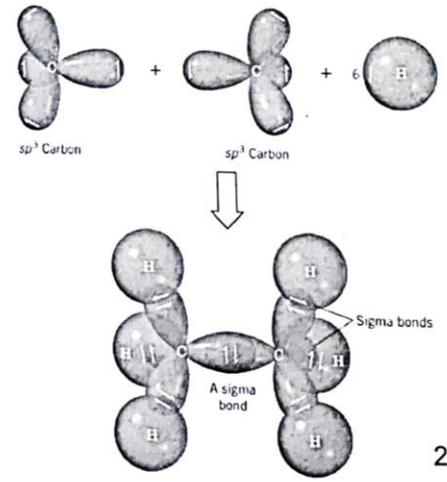


adesência de prótons que estavam separados



-Etano (C₂H₆)

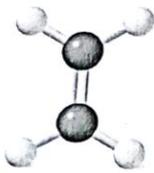
- A ligação C-C forma-se pela coalescência de 2 orbitais sp³ para formar uma ligação σ.
- A molécula é aproximadamente tetraédrica em torno de cada átomo.



ALCENOS

multo usado na fabricação de polímeros

Eteno ou **etileno** (usado na produção de etanol, óxido de etileno e polietileno):



eteno

O **eteno** é produzido por tomates e bananas e encontra-se envolvido no processo de amadurecimento.

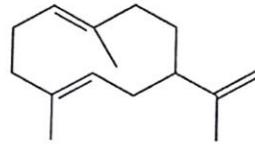
Também é utilizado pela indústria de fruta para parar o amadurecimento de bananas e tomates, uma vez que as frutas verdes são menos susceptíveis de danos durante o transporte.

Propeno ou propileno: Fórmula molecular C_3H_6 , utilizado para sintetizar polipropileno.

Muitos alcenos ocorrem naturalmente na natureza, Ex:



β -pineno



feromonas de alarme de insectos

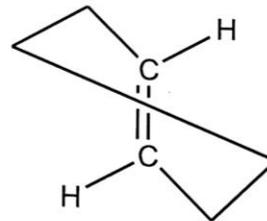


BETTER MINDS
De estudantes para estudantes

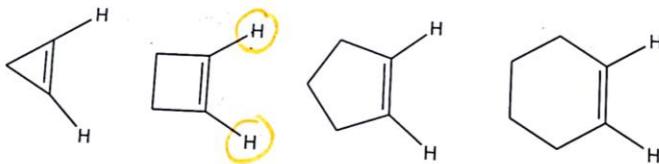
CICLOALCENOS

Os anéis de cicloalcenos de 5 ou menos átomos de carbono existem apenas na **forma cis**. A introdução de uma **ligação trans** provocaria um aumento da tensão do anel que levaria ao seu colapso.

Pensa-se que a estrutura do **trans-ciclo-hexeno** será do tipo:



Outros exemplos de **cis-cicloalcenos**:



O **trans-ciclo-hepteno** foi observado espectroscopicamente, mas é uma substância de vida curta e não foi isolado. O **trans-ciclo-octeno** foi isolado; trata-se de um anel suficientemente grande para permitir uma geometria **trans** e continuar estável à temperatura ambiente.

