

Química Orgânica



Química Orgânica

Em sua acepção moderna, a química orgânica é a divisão da química responsável pelo estudo dos compostos de carbono. Esta parte da química estuda a estrutura, propriedades, composição, reações e síntese de compostos orgânicos que, por definição, contenham carbono, mas que podem também conter outros elementos, como o oxigênio e o hidrogênio. Muitos deles contêm nitrogênio, halogênios e, mais raramente, fósforo e enxofre.

Originalmente proposta em 1777 pelo químico sueco Torbern Olof Bergman, a química orgânica foi primeiramente definida como um ramo químico que estudava os compostos extraídos dos organismos vivos, contrastando com a química inorgânica, que tratava dos compostos existentes no então chamado "reino mineral".

Em 1807, foi formulada a teoria da força vital por Jöns Jacob Berzelius. Ela baseava-se na ideia de que os compostos orgânicos precisavam de uma força maior — a vida — para serem sintetizados, tratando como impossível a síntese artificial desses compostos.

No entanto, em 1828, Friedrich Wöhler, discípulo de Berzelius, a partir do aquecimento de cianato de amônio, produziu a ureia, composto existente na urina animal. Isto é, Wöhler demonstrou ser possível a síntese de um composto orgânico, a ureia, a partir de um composto inorgânico, o cianato de amônio.

Tal processo ficou conhecido como síntese de Wöhler e, com essa descoberta, a teoria da força vital perdeu força. Em seguida, Pierre Eugene Marcellin Berthelot realizou uma série de experiências a partir de 1854 e, em 1862, sintetizou o acetileno. Em 1866, Berthelot obteve, por aquecimento, a polimerização do acetileno em benzeno e, assim, é derrubada a teoria da força vital.

Devido à inadequação da definição de Bergman para a química orgânica, o químico alemão Friedrich August Kekulé propôs, em 1858, a definição aceita atualmente:

"Química orgânica é o ramo da química que estuda os compostos do carbono."

Essa afirmação está correta, contudo, nem todo o composto que contém carbono é orgânico, como é o caso do dióxido de carbono, o ácido carbônico, a grafite, etc.

Ainda assim, todos os compostos orgânicos contêm carbono.

Química orgânica é a parte da química que estuda os compostos do elemento carbono, os também chamados compostos orgânicos, que possuem propriedades características.

Antes de sabermos em que consiste a parte orgânica da química, primeiro vamos saber qual a diferença básica entre a Química Orgânica e a Química Inorgânica.

Substâncias presentes nos organismos vivos são chamadas de compostos orgânicos e as presentes no reino mineral são compostos inorgânicos. A História da Química Orgânica relata que ela teve início somente no século XVIII, quando um cientista alemão, o químico Friedrich Wohler (1800-1882), deu início aos processos de obtenção de substâncias a partir de produtos naturais.

A Química Orgânica estuda a composição e as propriedades dos compostos que apresentam o carbono como principal elemento químico.

Funções orgânicas

a) Hidrocarbonetos

São as substâncias orgânicas que apresentam apenas os elementos carbono e hidrogênio em sua composição, como:

- ✓ Alcanos
- ✓ Alcenos
- ✓ Alcinos
- ✓ Alcadienos
- ✓ Ciclanos
- ✓ Ciclenos
- ✓ Aromáticos

b) Compostos orgânicos oxigenados

São as substâncias orgânicas que apresentam o elemento oxigênio em sua composição, como:

- ✓ Álcoois
- ✓ Fenóis
- ✓ Enóis

- ✓ Aldeídos
- ✓ Cetonas
- ✓ Ácidos carboxílicos

Sais de ácidos carboxílicos

- ✓ Anidridos
- ✓ Éteres
- ✓ Ésteres

c) Compostos orgânicos nitrogenados

São as substâncias orgânicas que apresentam o elemento nitrogênio em sua composição, como:

- ✓ Aminas
- ✓ Amidas
- ✓ Nitrocompostos
- ✓ Nitrilos
- ✓ Isonitrilos
- ✓ Sais de amônio quaternário

d) Compostos orgânicos sulfurados

São as substâncias orgânicas que apresentam o elemento enxofre em sua composição, como:

- ✓ Tiocompostos
- ✓ Ácidos sulfônicos

e) Compostos organoclorados

São as substâncias orgânicas que apresentam um ou mais halogênios (flúor, cloro, bromo e iodo) em sua composição, como:

- ✓ Haletos orgânicos
- ✓ Cloretos de ácido
- ✓ Compostos de Grignard
- ✓ Organometálicos

História

Século XVIII

No século XVIII, o químico Carl Wilhelm Scheele isolou compostos orgânicos a partir de seres vivos, como ácido tartárico ($C_4H_6O_6$) da uva, ácido cítrico ($C_6H_8O_7$) do limão, ácido láctico ($C_3H_6O_3$) do leite, glicerina ($C_3H_8O_3$) da gordura, e ureia (CH_4N_2O) da urina. Devido a sua origem comum, de organismos vivos, Torbern Bergman definiu, em 1777, que a química dos compostos orgânicos (isto é, a Química Orgânica) corresponde à química dos compostos existentes nos organismos vivos, vegetais e animais, enquanto a química inorgânica seria a química dos compostos existentes no reino mineral.

Na mesma época da proposta de Bergman, Antoine Lavoisier analisou vários compostos orgânicos e constatou que todos continham o elemento químico carbono.

Em 1807, Jöns Jacob Berzelius propôs que somente os seres vivos seriam dotados de uma “força vital” capaz de produzir os compostos orgânicos, implicando na impossibilidade da síntese de substâncias orgânicas de forma artificial, ou seja, preparadas em um laboratório ou em numa indústria.

Este conceito foi denominado vitalismo. Tais crenças eram reforçadas pela complexidade da estrutura química dos compostos orgânicos, quando comparadas à dos compostos inorgânicos.

Século XIX

Durante a primeira metade do século XIX, contudo, os químicos descobriram que os compostos orgânicos poderiam ser sintetizados em laboratório, contrariamente à proposta de Tobern Bergman. Por volta de 1816, Michel Chevreul preparou sabonetes feitos usando gorduras e álcalis.

Em 1828, Friedrich Wöhler produziu a ureia, um componente da urina, a partir do sal inorgânico cianato de amônio (NH_4CNO), sendo essa preparação atualmente chamada de síntese de Wöhler.

Embora Wöhler sempre tenha sido cauteloso sobre a alegação de que teria refutado a teoria da força vital, esse evento tem sido muitas vezes visto como um marco para o estabelecimento da química orgânica moderna.

Nos anos seguintes à síntese de Wöhler, muitas outras substâncias orgânicas foram sintetizadas. Em 1845, Adolph Kolbe conseguiu realizar a primeira síntese de um composto orgânico, o ácido acético, a partir de seus elementos componentes. Onze anos depois, o químico inglês William Perkin, ao tentar

fabricar o quinino, fabricou acidentalmente o corante orgânico conhecido como mauveína. Devido ao grande sucesso financeiro dessa descoberta, o interesse nos estudos em química orgânica aumentou significativamente, com Perkin servindo de exemplo para a indústria química na Inglaterra. Na Alemanha, o trabalho de August Wilhelm von Hofmann, antigo professor de Perkin, também possibilitou desenvolvimento da indústria química alemã no final do século XIX, graças às descobertas de vários corantes: a magenta, em 1858; a alizarina, em 1869; e o índigo, em 1880. Esses corantes tornaram-se úteis para a indústria têxtil, com a possibilidade de novas cores serem usadas em tecidos e também a produção mais barata de cores já existentes. Além disso, foram importantes para o desenvolvimento de técnicas analíticas para a biologia, através da coloração e do estudo de micro-organismos ao microscópio. Com o advento de tais descobertas, a partir da segunda metade do século XIX, os químicos passaram a acreditar na possibilidade de síntese de qualquer substância química, orgânica ou inorgânica.

Friedrich August Kekulé

O conceito de estrutura química foi crucial para o desenvolvimento de teorias em química orgânica, trabalhadas de forma simultânea e independente por Friedrich August Kekulé e Archibald Scott Couper em 1858.

Ambos sugeriram que os átomos de carbono tetravalente (que fazem quatro ligações) poderiam se ligar um ao outro para formar uma rede de átomos de carbono, e que os padrões dessas ligações podiam ser discernidos por interpretações adequadas de reações químicas que haviam ocorrido. A história da química orgânica continuou com a descoberta do petróleo e a sua separação em frações de acordo com a diferença no ponto de ebulição de seus componentes. Já a indústria farmacêutica teve seu início na última década do século XIX, com a fabricação do ácido acetilsalicílico (mais conhecido como aspirina) pela Bayer, na Alemanha.

Embora os primeiros exemplos de reações orgânicas e aplicações tenham sido frequentemente fortuitos, a segunda metade do século XIX testemunhou estudos altamente sistemáticos de compostos orgânicos. A síntese total de compostos naturais começou com ureia, e a complexidade aumentou com a obtenção da glicose e o terpineol.

Século XX

Na primeira metade do século XX, houve um grande desenvolvimento da indústria química orgânica nos Estados Unidos, com a descoberta, por exemplo, de diversos plásticos, como o raíom, o náilon, o teflon e o poliéster.

Esta época também foi marcada pela substituição do carvão pelo petróleo como principal fonte de matéria-prima para a indústria química orgânica. Devido a isso, surgiu uma gigantesca indústria petroquímica, tendo os materiais plásticos como produto principal.

Em 1907, cânfora obtida por síntese total foi comercializada pela primeira vez por Gustaf Komppa.

A partir do século XX, o progresso da química orgânica permitiu a síntese de moléculas altamente complexas. Ao mesmo tempo, os polímeros e as enzimas foram reconhecidos como grandes moléculas orgânicas, e foi mostrado que o petróleo possuía origem biológica.

Princípios

Características do carbono

O átomo de carbono apresenta certas particularidades que o torna diferente dos demais elementos químicos. Esse fato foi percebido na metade do século XIX e possibilitou uma melhor compreensão da estrutura das substâncias orgânicas.

Tetravalência do Carbono

O número atômico do carbono é 6, e sua configuração eletrônica apresenta dois elétrons na camada K (ambos no subnível 1s) e quatro elétrons na camada L (dois no subnível 2s e dois no subnível 2p). Tendo quatro elétrons em sua última camada eletrônica, o carbono os compartilha com quatro elétrons de outros átomos, para que se complete o octeto, atingindo-se a configuração estável.

Formam-se, desse modo, quatro ligações covalentes. A tetravalência do carbono foi reconhecida já em 1858 por Kekulé (denominado primeiro postulado de Kekulé).

Ligações múltiplas

Um átomo de carbono pode estabelecer uma, duas ou até três ligações com um segundo átomo, formando, respectivamente, uma ligação simples, uma

ligação dupla ou uma ligação tripla. Além disso, como prescreve a teoria de orbitais moleculares, o carbono se liga em diferentes configurações geométricas, dependentes da quantidade de ligações com cada elemento. Existem quatro possibilidades de como o carbono pode se ligar:

Quatro ligações simples, com quatro átomos diferentes conectados em estrutura tetraédrica;

Uma ligação dupla e duas simples, com três átomos diferentes em estrutura trigonal planar;

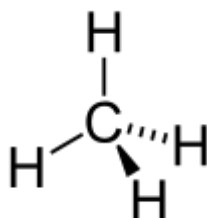
Duas ligações duplas, com dois átomos diferentes em estrutura linear;

Uma ligação tripla e uma simples, com dois átomos diferentes em estrutura linear.

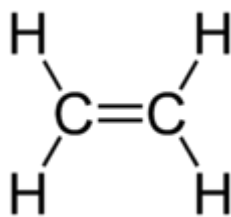
Para explicar as diferentes disposições espaciais do carbono e de seus átomos ligantes de uma forma simples, existe a teoria da repulsão dos pares eletrônicos da camada de valência (conhecida como teoria VSEPR, do inglês valence shell electron pair repulsion), parte do campo da estereoquímica.

O princípio básico da teoria VSEPR é que, ao redor do átomo central, os pares eletrônicos ligantes (que se ligam aos outros átomos) e os não-ligantes (pares eletrônicos livres) repelem-se, tendendo a ficar tão afastados quanto possível. Dessa forma, a molécula irá adquirir uma determinada geometria "espontaneamente", de modo a maximizar a sua estabilidade.

Apesar de simplificada, tal descrição é suficiente para entender o fenômeno da distribuição tetraédrica do carbono quando este faz quatro ligações simples, pois essa configuração posiciona cada átomo a que o carbono se liga o mais afastado possível dos outros três átomos, como ocorre na molécula de metano.



Metano, com apenas ligações simples.



Eteno ou etileno, com uma ligação dupla entre carbonos.



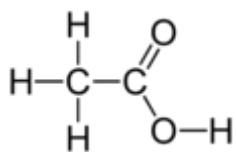
Etino, com uma ligação tripla entre carbonos.

Diversidade de elementos ligantes

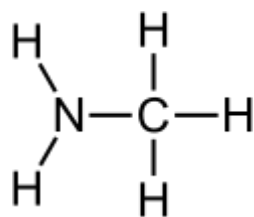
Devido à sua localização na tabela periódica, o carbono possui eletronegatividade intermediária entre os elementos eletropositivos e os elementos eletronegativos, permitindo com que ele faça ligações com os dois tipos de elementos químicos.

O hidrogênio é um elemento tipicamente encontrado nos compostos orgânicos (exceções incluem CCl_4 , C_2Cl_6 e CCl_2F_2) já que, por fazer apenas uma ligação simples, encontram-se nas extremidades dos compostos, completando as ligações que ainda restaram. Após o hidrogênio, os elementos mais frequentemente encontrados em compostos orgânicos são o oxigênio (O) e o nitrogênio (N). Por isso, carbono, hidrogênio, oxigênio e nitrogênio são por vezes referidos como elementos organógenos (elementos formadores de compostos orgânicos, etimologicamente).

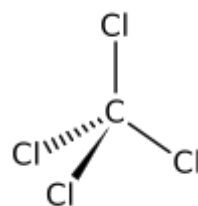
É também comum encontrar outros elementos que se liguem ao carbono: não-metais como o enxofre (S), o fósforo (P); os halogênios, isto é, flúor (F), cloro (Cl), bromo (Br) e iodo (I); e certos metais, como o ferro (Fe) e o magnésio (Mg).



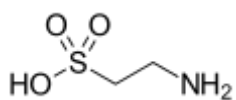
Ácido etanoico



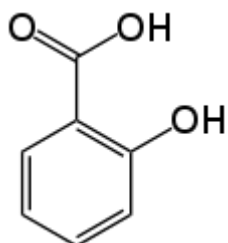
Metilamina



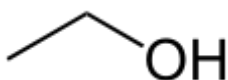
Tetracloreto de carbono



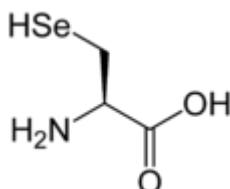
Taurina



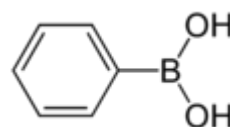
Ácido salicílico



Etanol



Selenocisteína



Ácido fenilborônico

Formação de cadeias

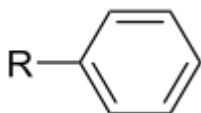
Átomos de carbono podem se ligar entre si ou a outros átomos formando encadeamentos ou cadeias, curtas ou longas, e com grande variedade de disposições (denomina-se essa característica como terceiro postulado de Kekulé). Essas cadeias constituirão o "esqueleto" das moléculas orgânicas.

Existem outros elementos químicos que conseguem formar cadeias, como o enxofre e o fósforo. Entretanto, nenhum elemento químico apresenta a capacidade de formar cadeias tão longas, variadas e estáveis como o carbono. A capacidade de formar cadeias aliada às características anteriormente descritas explicam a razão pela qual o carbono é capaz de formar um enorme número de compostos químicos.

O caráter da ligação é anfótero (não importa se é metal ou não-metal)

Possui três hibridizações: sp^3 , sp^2 e sp .

Funções orgânicas



Assim como na química inorgânica existem as funções inorgânicas (ácidos, bases, sais e óxidos), na química orgânica existem as funções orgânicas, ou seja, compostos orgânicos cujas características químicas e físicas são semelhantes. Existem muitas funções. Abaixo estão algumas das mais comuns:

Hidrocarbonetos

Os hidrocarbonetos constituem a função mais simples da química orgânica, por serem compostos apenas por carbono e hidrogênio. Uma grande importância é o fato de que servem como "esqueleto" para as demais funções orgânicas. Além disso, do ponto de vista econômico, os hidrocarbonetos são importantes por serem os principais formadores do petróleo, do gás natural e dos destilados do xisto betuminoso e do carvão mineral. Ademais, servem de ponto de partida para a obtenção industrial de plásticos, corantes, explosivos, inseticidas, dentre outros.

Existem ainda denominações mais específicas dentro da classe de hidrocarbonetos, como os alcanos, alcenos, alcinos, alcadienos, alceninos, cicloalcanos e cicloalcenos.

Haleto

Álcool

Enol

Fenol

Éter

Éster

Aldeído

Cetona

Ácido carboxílico

Aminas

Amida

Nitrocompostos

Nitrilas

Isonitrila

Compostos de Grignard

Nomenclatura dos compostos orgânicos

A nomenclatura dos compostos orgânicos é de extrema importância, pois existem, atualmente, dezenas de milhões dessas substâncias sendo utilizados em produtos industriais, em laboratórios e no cotidiano da sociedade. Assim, tais compostos precisam ser identificados internacionalmente, para que haja entendimento mútuo entre cientistas e pessoas em geral de qual substância está se tratando.

A nomenclatura dos compostos orgânicos é feita sistematicamente, seguindo um conjunto de regras produzidas pela União internacional da Química Pura e Aplicada (IUPAC, do inglês International Union of Pure and Applied Chemistry), ou não sistematicamente, baseando-se em tradições impostas pelo repetido uso dos nomes pelos químicos.

A IUPAC tem realizado reuniões internacionais com químicos profissionais de vários países desde 1892 para aperfeiçoar sua nomenclatura. Nela, o nome de um composto orgânico possui quatro partes: prefixo, localizador, cadeia principal e sufixo.

O prefixo especifica a localização e a identidade dos vários grupos substituintes na molécula;

O localizador informa a posição do grupo funcional primário;

A cadeia principal identifica a cadeia carbônica principal da molécula, informando quantos átomos de carbono fazem parte dela. Mais especificamente, o nome da cadeia principal também varia com infixos que indicam o número de ligações entre carbonos, também especificando sua posição;

O sufixo identifica o grupo funcional primário.

Prefixo

O prefixo é adotado conforme o número de carbonos na cadeia principal:

1 carbono: Met–

2 carbonos: Et–

3 carbonos: Prop–

4 carbonos: But–

5 carbonos: Pent–

6 carbonos: Hex–

7 carbonos: Hept–

8 carbonos: Oct–

9 carbonos: Non–

10 carbonos: Dec–

11 carbonos: Undec–

12 carbonos: Dodec–

13 carbonos: Tridec–

14 carbonos: Tetradec–

15 carbonos: Pentadec–

16 carbonos: Hexadec–

17 carbonos: Heptadec–

18 carbonos: Octadec–

19 carbonos: Nonadec–

20 carbonos: Eicos–

Infixos

É indicado pela classificação da cadeia quanto à saturação: Enquanto cadeias saturadas possuem apenas ligações simples entre os carbonos, as cadeias insaturadas possuem ligações duplas ou triplas entre carbonos.

Apenas ligações simples: –an–

Ligação dupla: –en–

Duas ligações duplas: –dien–

Três ligações duplas: –trien–

Ligação tripla: –in–

Duas ligações triplas: –diin–

Três ligações triplas: –triin–

Uma ligação dupla e uma tripla: –enin–

Sufixos

Os sufixos são colocados conforme a função orgânica do composto.

Hidrocarbonetos: –o

Alcanos: –ano

Alcenos/alquenos: –eno

Alcinos/alquinos: –ino

Ácidos carboxílicos: Ácido + –óico

Cetonas: –ona

Aldeídos: –al

Álcoois ou fenóis: –ol

Ésteres: –oato de –ila, sendo –ila o sufixo adotado para o radical.

Éteres: Radical menor + –oxi– + radical maior

Aminas: Radical + –amina

Amidas: Radical + –amida

Isomeria

A isomeria é um fenômeno estudado pela Química Orgânica em que duas ou mais substâncias químicas diferentes apresentam a mesma fórmula molecular, mas fórmulas estruturais e comportamentos físicos e químicos diferentes.

Os tipos de isomeria existentes são:

a) Isomeria plana

Isomeria que envolve o estudo das propriedades dos compostos orgânicos mediante a análise de suas fórmulas estruturais planas. Entre seus tipos principais, temos:

Isomeria plana de cadeia

Isomeria plana de posição

Isomeria plana de tautomeria

Isomeria plana de função

Isomeria plana de compensação

b) Isomeria geométrica

É um tipo de estereoisomeria que estuda a posição (em planos diferentes) dos ligantes em uma estrutura orgânica. Os tipos de isomeria geométrica são:

Isomeria geométrica cis-trans

Isomeria geométrica E-Z

c) Isomeria óptica

É um tipo de estereoisomeria que estuda o comportamento de uma molécula orgânica quando ela é submetida a um feixe de luz polarizada. Assuntos importantes que envolvem esse tipo de isomeria são:

Compostos quirais

Carbono quiral ou assimétrico

Isômeros ativos

Reações orgânicas

Reações orgânicas são fenômenos químicos nos quais uma ou mais substâncias orgânicas podem ser originadas a partir da utilização de uma ou mais substâncias orgânicas como reagentes.

Vários são os tipos de reações orgânicas, a saber:

Reação de adição

Reações de substituição

Reações de eliminação

Reações de oxidação

Reações de esterificação

Reações de combustão

Reações de diferenciação

Nomenclaturas de compostos orgânicos

Metano

Número de carbonos: Met- = 1 carbono

Tipo de ligação entre os carbonos: -an- = simples

Função química do composto: -o = hidrocarboneto

Logo: CH₄

Butano

Número de carbonos: But- = 4 carbonos

Tipo de ligação entre os carbonos: -an- = simples

Função química do composto: -o = hidrocarboneto

Logo: CH₃-CH₂-CH₂-CH₃

Etanol

Número de carbonos: Et- = 2 carbonos

Tipo de ligação entre os carbonos: -an- = simples

Função química do composto: -ol = álcool

Logo: CH₃-CH₂-OH

Propenal

Número de carbonos: Prop- = 3 carbonos

Tipo de ligação entre os carbonos: -en- = dupla

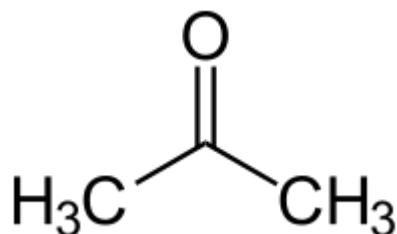
Função química do composto: -al = aldeído

Logo: CH₂=CHCOH

Reações em química orgânica

Substituição	Reação de Bucherer
Eliminação	Reação de Cannizzaro
Reação de Wolff-Kischner	Reação de Chugaev
Rearranjo de Beckmann	Reação de Claisen
Reação de Diels-Alder (Cicloadição)	Reação de Etard
Oxidação de Swern	Redução de Clemmensen
Oxidação de um álcool	Reação de Grignard
Alquilação de Friedel-Crafts	Condensação aldólica
Reação de Pinner	Fermentação acética
Reações de Wurtz e de Wurtz-Fittig	Reação de Ramberg-Bäcklund

Composto orgânico



Acetona ou propanona

Os compostos ou moléculas orgânicas são, na sua generalidade, as substâncias químicas que contêm na sua estrutura Carbono e ligações covalentes C-H, ou substâncias que sejam derivados destas (por exemplo o CCl₄, derivado do clorofórmio). Na realidade, quase todos os compostos com carbono pertencem a esta classe de compostos, à exceção dos carbetos (CaC₂, Ag₂C₂, entre outros), carbonatos e bicarbonatos (Na₂CO₃ e NaHCO₃, respetivamente), cianetos (HCN), óxidos de carbono (CO e CO₂), assim como os alótropos do carbono grafite e grafeno, diamante e o fulereno.

As moléculas orgânicas apresentam geralmente outros elementos como o oxigênio, nitrogênio, enxofre, fósforo, boro, halogênios entre outros.

Glicose

As moléculas orgânicas podem ser:

Moléculas orgânicas naturais: Encontram-se na natureza e são sintetizadas pelos seres vivos, denominadas biomoléculas, que são estudadas pela bioquímica. Podem, no entanto, ser sintetizadas em laboratório.

Moléculas orgânicas artificiais: São substâncias orgânicas que não existem na natureza e têm sido fabricadas pelo ser humano, como os plásticos. A maioria dos compostos orgânicos puros são produzidos artificialmente.

A linha que divide as moléculas orgânicas das inorgânicas tem originado polêmicas e historicamente tem sido arbitrária, porém, geralmente os compostos orgânicos apresentam carbono ligado a hidrogênio, e os compostos inorgânicos não. Deste modo, o ácido carbônico é inorgânico, entretanto, o ácido fórmico, o primeiro ácido carboxílico, é orgânico. O anidrido carbônico e o monóxido de carbono são compostos inorgânicos. Portanto, todas as moléculas orgânicas contêm carbono, porém nem todas as moléculas que tem carbono, são moléculas orgânicas.

A etimologia da palavra "orgânico" significa que procede de "organos", relacionada com a vida, em oposição ao inorgânico que teria o significado de tudo que carece de vida.



Síntese de Wohler

Para os químicos antigos, as substâncias orgânicas eram provenientes de fontes animais ou vegetais, e as substâncias inorgânicas seriam aquelas de procedência mineral. Durante muitos anos acreditava-se que entre a química orgânica e a química inorgânica existia uma barreira intransponível. No

princípio do século XIX, o químico alemão Friedrich A. Wöhler conseguiu sintetizar a ureia, um produto orgânico, a partir de substâncias inorgânicas (o cianato de amônio), comprovando que tal divisão era totalmente artificial, algo que é completamente evidente na química moderna.

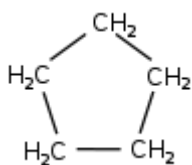
Hidrocarbonetos ou carbonetos de hidrogênio

Hidrocarbonetos alifáticos saturados

alcanos

4-metil octano (CAS 2216-34-4)

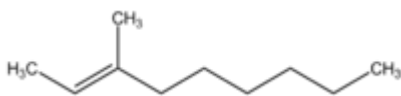
cicloalcanos



ciclopentano (CAS 287-92-3)

Hidrocarbonetos etilénicos, etênicos, olefinas, alquenos ou alcenos.

Alcenos mono-insaturados



3-metil non-2-eno (CAS 539-53-3)

Alcenos

buta-1,2-dieno ou metil aleno (CAS 590-19-2)

Cicloalcenos

ciclopenteno (CAS 142-29-0)

ciclodienos

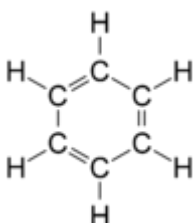


ciclopenta-1,3-dieno (CAS 742-92-7)

Hidrocarbonetos acetilênicos ou alcinos:

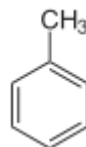
pent-2-ino (CAS 627-21-4)

Hidrocarbonetos aromáticos



benzeno (CAS 71-43-2) $\text{H}_3\text{x-c}\{\text{o}\}$

benzeno (nomenclatura oficial IUPAC) (CAS 108-88-3)



tolueno ou metil

Funções orgânicas monovalentes

Neste caso, função monovalente é aquela onde cada carbono em pauta é ligado só com um elemento só que não seja o próprio carbono ou o hidrogênio. as divalentes com dois, trivalentes com três e tetravalentes quatro

Halogeneto de alquila ou haleto de alquila (br)



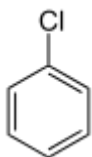
1-bromo-heptano (CAS 629-04-9)

haleto de alila



3-bromo prop-1-eno (CAS 106-95-6)

Haleto aromáticos



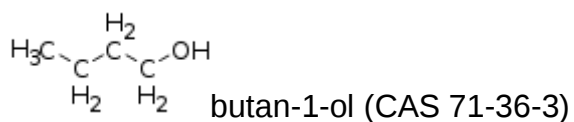
cloreto de fenila(usual) 1-cloro benzeno(oficial) (CAS 100-47-7)

Compostos organometálicos

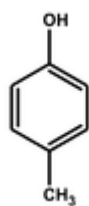
$\text{H}_3\text{C}-\text{Zn}-\text{CH}_3$ dimetil zinco (CAS 544-97-8)

Os derivados monovalentes com oxigênio

Álcoois

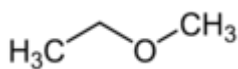


Fenóis



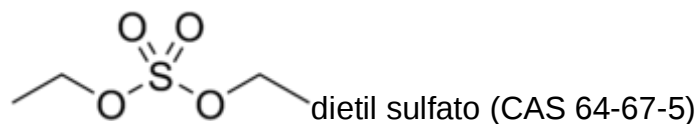
1-hidroxi 4-metil benzeno ou para tolueno

Éter-óxidos

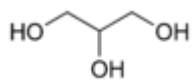


Éter etílico e metílico(usual) etóxi metano(Oficial IUPAC) (CAS 540-67-0)

Éter-sais dos ácidos minerais

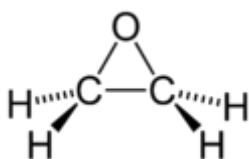


poliálcois



glicerol ou propan-1,2,3-triol (CAS 56-81-5)

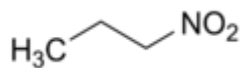
Epóxidos



Óxido de etileno ou epoxietano (CAS 75-21-8)

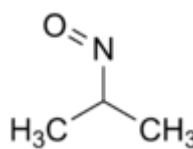
Os derivados monovalentes com nitrogênio

Compostos nitrados



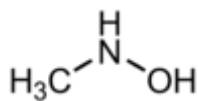
1-nitropropano (CAS 108-03-2)

Compostos nitrosados



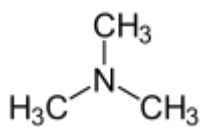
2-nitrosopropano (CAS 920-40-1)

Hidroxilaminas



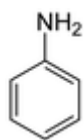
metil hidroxilamina (CAS 593-77-1)

Aminas alifáticas



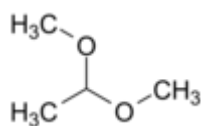
trimetilamina (CAS 75-50-3)

Aminas aromáticas



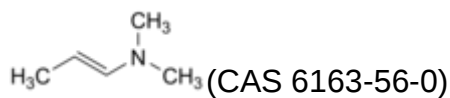
anilina ou amino benzeno (CAS 62-53-3)

Acetais (e os hemi-cetais, os acétais, os hemi-acétais)



1,1 dimetoxi etano (CAS 534-15-6)

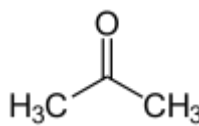
Enaminas



(CAS 6163-56-0)

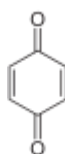
As funções orgânicas divalentes

Cetonas



acetona ou propan-2-ona (CAS 67-64-1)

Quinonas



benzoquinona (108-88-3)

Aldeídos

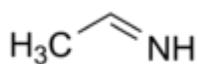


pentanal (CAS 110-62-3)

Cetenas

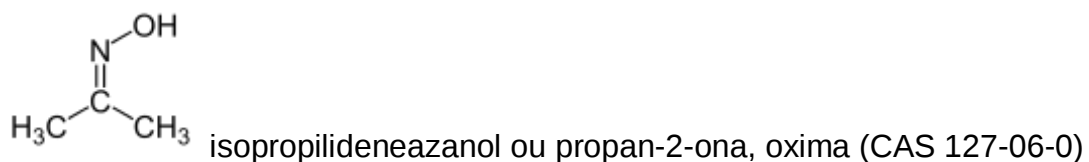
metilcetena (CAS 6004-44-0)

Iminas

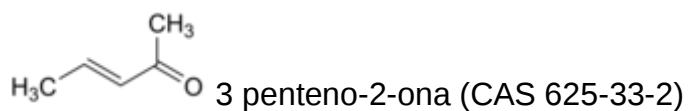


acetaldimina (CAS 20729-41-3)

Óximas

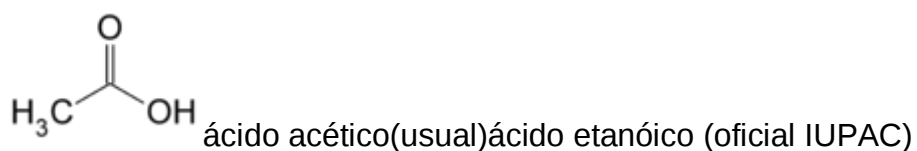


Cetonas α - β -insaturadas

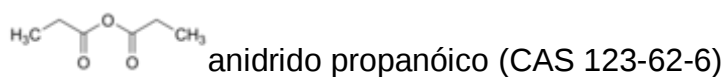


As funções orgânicas trivalentes

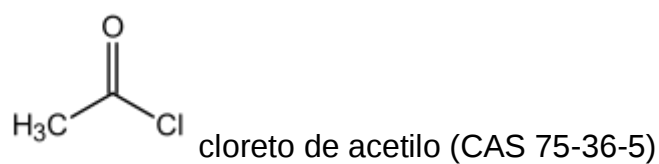
Ácidos carboxílicos



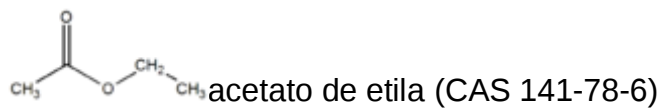
Anidridos



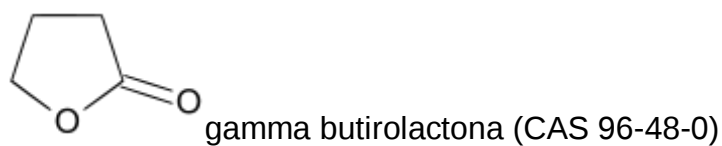
Haletos de ácido



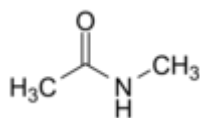
Ésteres



Lactonas

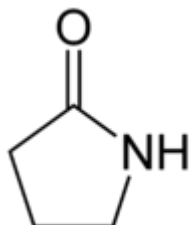


Amidas



N. metil acetamida (CAS 79-16-3)

Lactamas



butirolactama ou 2-pirolidinona (CAS 616-45-5)

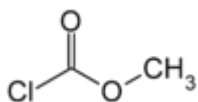
Nitrilas

acetonitrila (CAS 75-05-8)

Isonitrilas

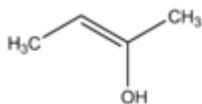
As funções orgânicas tetravalentes

Cloroformiatos



cloroformiato de metila (CAS 79-22-1)

Enois



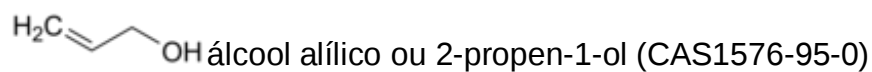
2-buten-3-ol (CAS 21451-76-3)

Os derivados não saturados

Eteres isocianicos

metil de isocianato (CAS 624-83-9)

Álcoois alílicos



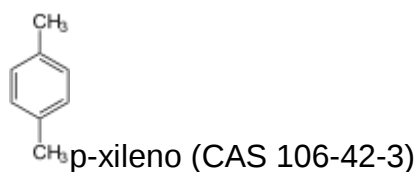
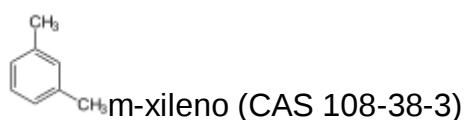
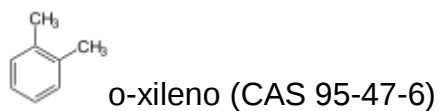
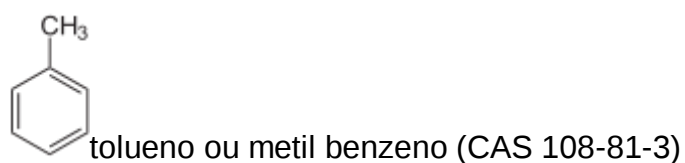
Álcoois homo-alílicos

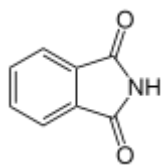


Os compostos aromáticos

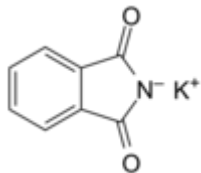
Os compostos aromáticos contêm um ciclo de átomos de carbono de tipo do benzeno ou similar. Se o ciclo contêm um outro elemento que o carbono, fala-se de heterociclo.

O benzeno e seus derivados

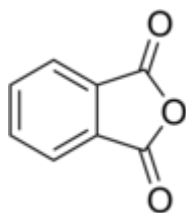




ftalimida (CAS 85-41-6)

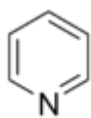


ftalimida de potássio

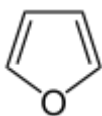


anidrido ftálico (CAS 85-44-9)

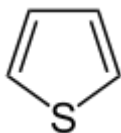
Os heterociclos



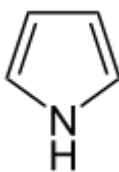
piridina (CAS 110-86-1)



furano (CAS 110-00-9)



tiofene (CAS 110-02-1)



pirrol (CAS 109-97-7)

Outros

Podemos também citar os compostos incluídos em outros ramos da química:

- * Os polímeros

- * Os compostos organo-metálicos

todos os seres químicos existentes incluindo o petróleo.

Reação Química

Fumaça branca de cloreto de amônio resultante da reação química entre amônia e ácido clorídrico.

Uma reação química é uma transformação da matéria na qual ocorrem mudanças qualitativas na composição química de uma ou mais substâncias reagentes, resultando em um ou mais produtos.

Envolve mudanças relacionadas à mudança nas conectividades entre os átomos ou íons, na geometria das moléculas das espécies reagentes ou ainda na interconversão entre dois tipos de isômeros. Para iniciar a reação, geralmente é necessário energia na forma de calor.

Resumidamente pode-se afirmar que uma reação química é uma transformação da matéria em que pelo menos uma ligação química é criada ou desfeita.

Um aspecto importante sobre uma reação química é a conservação da massa e o número de espécies químicas microscópicas (átomos e íons) presentes antes e depois da ocorrência da reação. Essas leis de conservação se manifestam microscopicamente sob a forma das leis de Lavoisier, do mestre Proust e de Dalton.

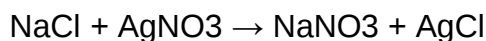
De fato, essas leis, no modelo atômico de Dalton, se justificariam pelas leis de conservação acima explicitadas e pelo fato de os átomos apresentarem valências bem definidas. Ao conjunto das características e relações quantitativas dos números de espécies químicas presentes numa reação dá-se o nome de estequiometria.

Deve-se salientar que uma ligação química ocorre devido a interações entre as nuvens eletrônicas dos átomos, e que então reação química apenas envolve mudanças nas eletrosferas. No caso de ocorrer mudanças nos núcleos atômicos teremos uma reação nuclear.

Ao passo que nas reações químicas a quantidade e os tipos de átomos sejam os mesmos nos reagentes e produtos, na reação nuclear, as partículas subatômicas são liberadas, o que causa redução de sua massa, sendo este um

fato relacionado à existência de elementos isóbaros, isótonos e isótopos entre si.

Um exemplo de uma reação química é (ambos os reagentes em solução aquosa)

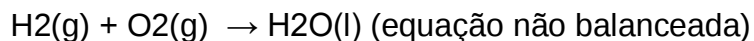


Nesta reação química, ao passo que o NaNO_3 permanece em solução, formou-se uma ligação entre a prata (Ag) e o cloro (Cl) o que resultou em um produto sólido de cloreto de prata (AgCl), pode-se então dizer que houve uma reação química.

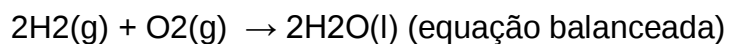
Balanceamento de equações químicas

Em uma reação química os elementos e o número de átomos de cada elemento têm de ser os mesmos antes e depois da reação (equação balanceada). Durante a reação química não ocorre destruição ou criação de novos átomos, o que muda é a forma com que os átomos estão organizados, podendo haver transferência de elétrons de um átomo para outro. Por esse motivo sempre é preciso verificar se as equações químicas estão balanceadas.

Para realizar o balanceamento de uma equação é necessário adicionar coeficientes (números inteiros que colocados antes de cada substância, tornam o número de átomos iguais em cada membro da equação). Os coeficientes indicam apenas a proporção entre os átomos, não alterando os índices (números menores que aparecem depois do elemento) das formulas, pois isso alteraria a natureza química da substância.



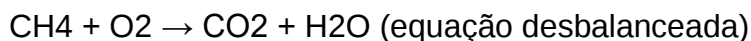
O primeiro membro da equação apresenta dois átomos de hidrogênio e dois de oxigênio. No segundo membro o hidrogênio também apresenta dois átomos, porém o oxigênio apresenta apenas um, ou seja, a equação está desbalanceada.



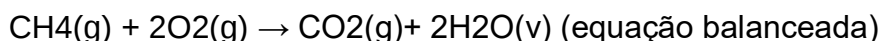
Após o balanceamento, são observados quatro átomos de hidrogênio no primeiro e no segundo membros da equação. E em relação ao oxigênio, são observados dois átomos no primeiro e no segundo membros.

As letras entre parênteses presentes nas equações representam o estado físico de cada elemento. Sendo assim, (l) líquido; (s) sólido; (g) gás; (aq) substância em solução aquosa; (v) vapor.

Em equações mais complicadas, devemos começar o balanceamento sempre pelo elemento que aparece apenas uma vez em cada membro da equação, por exemplo:



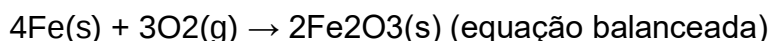
Neste caso tanto o carbono quanto o hidrogênio aparecem apenas uma vez em cada membro da equação, portanto o balanceamento começa por eles. Depois que esses forem balanceados, deve-se conferir se o número dos outros átomos está correto.



No caso de todos os elementos aparecerem apenas uma vez em cada membro da equação, deve-se começar o balanceamento pelo elemento com maior índice. Por exemplo:



Neste exemplo o balanceamento se inicia pelo oxigênio, pois ele apresenta o maior índice (3). Depois deve-se conferir se o número de átomos de ferro está correto.



Causas das reações químicas

O acontecimento de reações deve-se a fatores termodinâmicos e cinéticos.

Termodinâmico

Quanto à termodinâmica, o acontecimento de uma reação é favorecido com o aumento da entropia e a diminuição da energia. Essas duas grandezas se cooperam nesse caso de acordo com a seguinte equação:

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S \text{ (para sistemas a pressão constante)}$$

$$\Delta A = \Delta U - T \cdot \Delta S \text{ (para sistemas a volume constante)}$$

Onde T é a temperatura em kelvin, ΔH é a variação da entalpia (que é igual a energia absorvida ou liberada em pressão constante) entre os reagentes e os produtos, ΔU é variação da energia interna (que é igual a energia absorvida ou liberada a volume constante) entre eles, ΔS é a variação da entropia entre os mesmos, ΔG é uma grandeza chamada de energia livre de Gibbs e ΔA é uma grandeza chamada de energia de Helmholtz.

Se ΔA e ΔG forem maiores que zero em dadas condições, a reação é dita como não espontânea nessas condições, e ela ocorre ou não ocorre em escala apreciável. Na situação de ΔA e ΔG iguais a zero teremos um equilíbrio químico.

Caso ΔA e ΔG sejam menores que zero em dadas condições, dizemos que a reação é termodinamicamente favorável nestas condições, ou seja, ela é espontânea. Contudo é importante notar que uma reação ser espontânea não necessariamente significa que ela ocorra rapidamente.

Cinética

Nesse ponto, entram os fatores cinéticos. Para que uma reação ocorra é necessário que antes, os reagentes superem uma certa barreira de energia, e quanto maior for essa barreira mais difícil será a reação ocorrer e mais lenta ela será. Dessa forma, uma reação termodinamicamente favorável pode ocorrer de forma extremamente lenta ou acabar nem sendo observada em um

intervalo de tempo consideravelmente grande; então se diz que a reação é cineticamente desfavorável. Um bom exemplo disso é o carvão e o diamante, que são duas formas diferentes de carbono (alótropos); em condições normais a transformação de diamante a carvão é termodinamicamente favorável porém cineticamente desfavorável, o que faz com que fossem necessários centenas ou milhares de anos para se observar alguma mudança em um diamante. É preciso entender que uma reação para ser cineticamente viável, necessita primeiramente ser termodinamicamente possível.

Tipos de reações químicas

Tradicionalmente, as reações químicas podem ser classificadas de acordo com o número de reagentes e produtos em cada membro da equação química que representa a reação:

reações de síntese, composição ou adição ($A + B = AB$)

reações de análise ou decomposição ($AB = A + B$);

reações de simples troca ou deslocamento ($AB + C = AC + B$)

reações de dupla troca ($AB + CD = AD + CB$).

Outra classificação categoriza as reações em dois tipos:

reações de oxirredução ou reações redox

as demais reações

Algumas reações de síntese, algumas de análise, todas de simples troca e nenhuma de dupla troca são reações de oxirredução

Classes de reações por molécula:

Reações unimoleculares, em que um reagente sofre ruptura e/ou formação de ligação para produzir diferentes produtos;

Reações bimoleculares, em que dois reagentes colidem e depois sofrem ruptura e/ou formação para produzir diferentes produtos;

Reações de associação termolecular, em que dois reagentes colidem para formar um complexo molecular com uma nova ligação química entre os dois reagentes e uma terceira molécula, remove uma parte da energia cinética interna dessa molécula para estabilizá-la.

Reação quimicamente termolecular, uma reação mediada por um complexo de colisão efêmera (HO₂) formado a partir da colisão de duas moléculas (H, O₂) que então reage após colidir com uma terceira molécula (H).

Um tipo de reação que não encontra paralelo nas classificações acima é a chamada reação de isomerização.

Ainda existem uma série de reações que são estudadas em Química Orgânica, ou seja, sub-classes de reações, tais como : Reações de Halogenação, Reações de Hidrogenação, Reações de Substituição Nucleofílica etc.

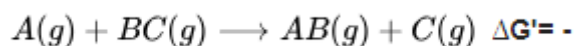
Mecanismo de Reação

O mecanismo de reação é o conjunto das fases ou estados que constituem uma reação química, em outros termos é a sequência, etapa por etapa de reações elementares pela qual toda a reação química ocorre.

Os mecanismos de reação estão ligados à cinética química.

Desde um ponto de vista termodinâmico, uma equação química, os reagentes são o estado inicial e os produtos o estado final, há uma variação de energia livre. A energia livre deve ser negativa já que será uma reação espontânea, ou seja, que a reação poderá levar-se a cabo sem nenhum impedimento termodinâmico.

Para tornar mais fácil a explicação será melhor fazê-lo com um exemplo:



Para fazer a ligação A-B, os reativos têm de encurtar as distâncias, mas isto aumenta a força de repulsão dos elétrons. Para evitar esta repulsão, os reativos terão que aproximar-se com suficiente energia cinética. Acima desta energia, as moléculas A e B formam ligações e em correspondência, as moléculas B e C estão rompendo as suas. Neste momento há um complexo

formado por A, B e C, chamado complexo ativado. Ao final todas as ligações de B e C serão rompidos e as ligações A e B serão formadas, ou seja, os produtos.

Também há de se fazer menção à energia de ativação, que é a diferença entre a energia dos reativos e a do complexo ativado. Se pode considerar como uma barreira energética que deve passar os reativos para passar a ser produtos.

Há dois tipos de mecanismo, dependendo do número de etapas que contém:

Reações elementares

Transcorre em somente uma etapa. Esta reação se produz com a formação de um só complexo ativado e só tem que superar uma barreira energética. Se representa em uma só equação química.

Reações complexas

Transcorre em duas ou mais etapas, com formação de intermediários. Também podemos dizer que é um conjunto de reações elementares, onde há mais de uma formação de complexos ativados diferentes e supera diferentes barreiras energéticas. Se expressa em várias equações químicas ou uma global. Na equação química global, representa o estado inicial e o estado final do global das reações, mas não apresenta como tenha-se transcorrido a reação.

Os intermediários são moléculas que aparecem no mecanismo da reação, mas não na equação inicial.

Molecularidade

A molecularidade é o número de moléculas que tomam parte como reativos em uma reação elementar. Dependendo do número de moléculas que participam, se classificam:

Unimoleculares: Só participa uma molécula.

Bimoleculares: Participam 2 moléculas.

Trimoleculares: Participam 3 moléculas (esta é muito rara).

Modelagem

Um correto mecanismo de reação é uma parte importante de precisão modelagem preditiva. Para muitos casos de combustão e sistemas de plasma, mecanismos detalhados não estão disponíveis ou ainda exigem desenvolvimento.

Mesmo quando a informação está disponível, identificando e organizando-se os dados relevantes de uma variedade de fontes, a conciliação entre valores discrepantes e a extrapolação à diferentes condições pode ser um processo difícil sem ajuda especializada. Constantes de velocidade ou dados termoquímicos muitas vezes não estão disponíveis na literatura, técnicas de química computacional e/ou métodos de aditividade de grupos devem ser usado para obter os parâmetros necessários. Nas diferentes fases de elaboração de um mecanismo de reação, métodos apropriados devem ser utilizados.

Carbono Assimétrico ou Quiral

Um carbono assimétrico ou quiral é um átomo de carbono que está ligado a quatro grupos diferentes entre si.

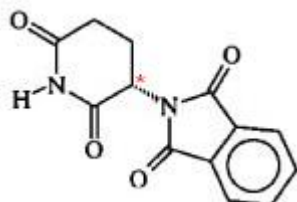
Em 1874, o químico holandês Jacobus Henricus van't Hoff (1852-1911) e o químico francês Joseph Achille Le Bel (1847-1930), por meio de teorias matemáticas, sugeriram de modo independente a existência de carbonos assimétricos.

Na época, eles foram criticados duramente, principalmente van't Hoff, pelo famoso químico alemão Adolph Wilhelm Kolbe (1818-1884). No entanto, Kolbe estava enganado, hoje sabemos que existe sim um carbono assimétrico, tanto que, em 1901, van't Hoff foi o primeiro químico a receber o prêmio Nobel.

Uma das condições necessárias para que a molécula possua atividade óptica é que ela seja assimétrica. Além disso, um modo de verificar se ela é assimétrica

é estudando sua estrutura detalhadamente para ver se ela possui, pelo menos, um carbono assimétrico.

Um exemplo de molécula assimétrica é a talidomida, cuja estrutura é mostrada a seguir:



O ponto localizado com um asterisco (*) corresponde a um carbono assimétrico, pois ele possui quatro ligações covalentes que são feitas com diferentes átomos ou grupos de átomos.

Compostos Organometálicos

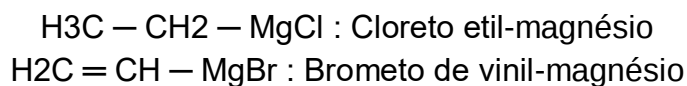
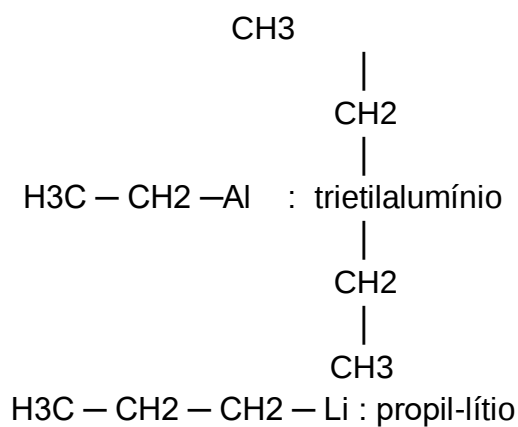
Os compostos organometálicos são aqueles que apresentam pelo menos um átomo de um metal ligado diretamente ao átomo de carbono.

Organometálicos são os compostos orgânicos que possuem pelo menos um átomo de metal ligado a um átomo de carbono. Normalmente os metais que formam esse tipo de substância são: magnésio (Mg), zinco (Zn), chumbo (Pb) e mercúrio (Hg).

Dentre os organometálicos mais comuns estão os organomagnésios, mais conhecidos como compostos ou reagentes de Grignard, cujo metal ligado ao carbono é o magnésio, e ele, por sua vez, está ligado a um halogênio, que pode ser um dos seguintes elementos da família 17 da Tabela Periódica: flúor (F), cloro (Cl), bromo (Br) e iodo (I).

Os compostos organometálicos são normalmente tóxicos, pois possuem metais que se acumulam no organismo e são mais solúveis em compostos orgânicos do que outros compostos inorgânicos que têm a presença desses metais. Um exemplo em que isso pode ser visto é quando garimpeiros ou indústrias jogam compostos organometálicos em lagos e rios. Os resultados são graves

problemas para a saúde dos usuários dessas águas (tanto humanos como animais), como também outros problemas ecológicos.

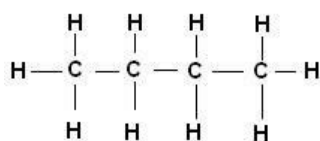


Hidrocarbonetos

Hidrocarbonetos são compostos que apresentam em sua composição átomos de Carbono e Hidrogênio. Vejamos as características dos principais Hidrocarbonetos:

- Alcanos: são hidrocarbonetos alifáticos saturados, isto é, apresentam cadeia aberta com simples ligações apenas.

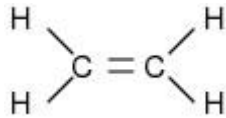
Fórmula geral: $\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$



Butano: C_4H_{10}

- Alcenos: ou olefinas, são hidrocarbonetos alifáticos insaturados que apresentam uma dupla ligação.

Fórmula geral: C_nH_{2n}



Eteno: C₂H₄

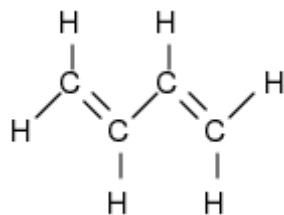
- Alcinos: são hidrocarbonetos alifáticos insaturados por uma tripla ligação.
Fórmula geral: C_nH_{2n-2}



Etino: C₂H₂, também conhecido como Acetileno.

- Alcadienos: são hidrocarbonetos alifáticos insaturados por duas ligações duplas.

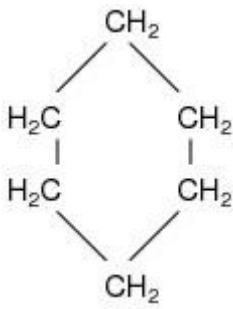
Fórmula geral: C_nH_{2n-2}



1,3-Butadieno: C₄H₆

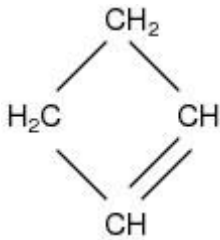
Hidrocarbonetos Cíclicos

- Cicloalcanos: apresentam cadeia fechada com apenas simples ligações.



Ciclohexano: C₆H₁₂

- Cicloalcenos: são hidrocarbonetos cíclicos insaturados por uma dupla ligação.



Ciclobuteno: C₄H₆

- Aromáticos: ou Arenos, são hidrocarbonetos em cuja estrutura existe pelo menos um anel benzênico (aromático).



Anel Benzeno: C₆H₆

Composição química

Composição química é o conjunto de moléculas dos elementos químicos constituintes de uma certa substância.

Composição química básica dos seres vivos

Todo ser vivo possui, em sua matéria, os seguintes elementos químicos: carbono (C), hidrogênio (H), oxigênio (O), nitrogênio (N), fósforo (P) e enxofre (S), que ao lado de outros elementos que aparecem em menor escala, formam substâncias complexas que constituem os seres vivos, denominados compostos orgânicos, como os carboidratos, as proteínas, os lipídios, as vitaminas e os ácidos nucleicos.

Dois átomos de hidrogênio e um de oxigênio formam uma molécula de água, essas unidas formam uma substância inorgânica.

O grupo básico de elementos, que forma a molécula de aminoácido, é denominado carboxila (CHOH). Na natureza são encontrados vinte aminoácidos diferentes, que se combinam de modos diferentes, por formato, tipo, quantidade, número e sequência, formando as proteínas e peptídeos. Além destas combinações, as proteínas são formadas por quatro níveis diferentes de agrupamentos moleculares. Todas estas combinações permitem um número muito grande de variações de proteínas.

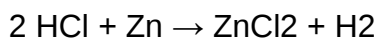
Reagente químico

Um reagente químico ou reativo químico é uma espécie química usada numa reação química. Implica geralmente numa substância química que é adicionado com a finalidade de provocar um fenômeno químico. As substâncias inicialmente presentes num sistema e que se transformam em outras devido à ocorrência de uma reação química são denominadas reagentes. E as novas substâncias produzidas são chamadas produtos de limpeza da natureza.

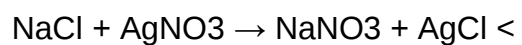
Por exemplo, o ácido clorídrico é um reagente químico que provoca a liberação de CO₂ do carbonato de cálcio:



Similarmente, o ácido clorídrico é um reagente químico que reage com o zinco produzindo gás hidrogênio, sendo o hidrogênio proveniente do ácido:



Na reação representada abaixo o sal (NaCl) e o nitrato de prata (AgNO₃) são os reagentes e o nitrato de sódio (NaNO₃) juntamente com o cloreto de prata (AgCl) são os produtos da reação.



Classificar alguns dos produtos químicos envolvidos numa reação química como um “reagente” é na maioria das vezes uma questão de convenção ou perspectiva.