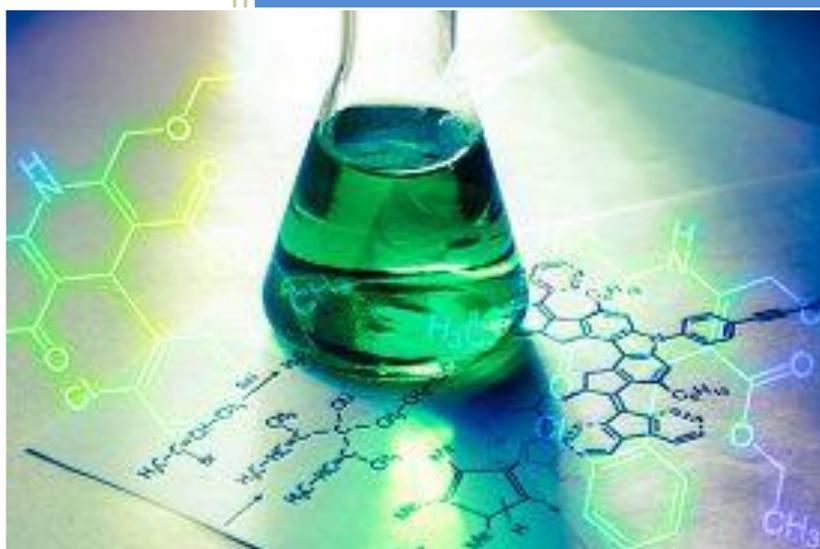


# Química Orgânica



## Química Orgânica

A tabela periódica é uma disposição sistemática dos elementos químicos ordenados por seus números atômicos, configuração eletrônica, e recorrência das propriedades periódicas. Este ordenamento mostra tendências periódicas, tais como elementos com comportamentos similares na mesma coluna. Também mostra quatro blocos retangulares com propriedades químicas similares. Em geral, dentro de uma linha (período) os elementos são metálicos na esquerda e não-metálicos na direita.

As linhas da tabela são denominadas períodos; as colunas são denominadas grupos. Seis grupos têm nomes específicos além de uma numeração: por exemplo o grupo 17 são os halogênios; e o grupo 18 são os gases nobres. A tabela periódica pode ser usada para deduzir as relações entre as propriedades dos elementos, e prever as propriedades dos novos elementos ainda não descobertos ou sintetizados. A tabela fornece uma estrutura útil para analisar o comportamento químico, e é amplamente utilizada na química e em outras ciências.

O químico Dmitri Mendeleev publicou em 1869 a primeira versão amplamente reconhecida da tabela. Seu trabalho no desenvolvimento da tabela demonstra as tendências periódicas dos elementos até então conhecidos e também prevê algumas propriedades dos elementos ainda não descobertos que iriam preencher espaços vazios em sua tabela. A maioria de suas previsões se mostrou correta quando os elementos em questão foram descobertos posteriormente. Desde então a tabela de Mendeleev tem sido expandida e refinada com a descoberta ou sínteses de novos elementos e o desenvolvimento de modelos teóricos para explicar o comportamento químico.

Todos os elementos do número atômico 1 (hidrogênio) ao 118 (Oganessônio) foram descobertos ou sintetizados, sendo as adições mais recentes (elementos 113, 115, 117 e 118) confirmadas pela IUPAC em dezembro de 2015. Os primeiros 94 elementos existem naturalmente, embora alguns sejam encontrados somente em quantidades de traços e foram sintetizados em laboratório antes de serem encontrados na natureza. Elementos com o número atômico de 95 ao 118 foram somente sintetizados em laboratório ou reatores nucleares. Têm sido buscada a síntese de elementos com números atômicos maiores. Vários elementos radionuclídeos sintéticos ou que ocorrem naturalmente também têm sido produzidos em laboratórios.

Em Dezembro de 2017 a Organização das Nações Unidas declarou o ano de 2019 como o Ano Internacional da Tabela Periódica, em reconhecimento da importância da crescente constatação global de como a química promove o

desenvolvimento sustentável, e fornece soluções para os desafios globais nos campos da energia, educação, agricultura e saúde.

Cada elemento químico tem um número atômico único (Z) representando o número de prótons em seu núcleo atômico. A maioria dos elementos tem um número diferente de nêutrons entre átomos diferentes, com estas variações sendo referidas como isótopos. Por exemplo, o carbono tem três isótopos naturais: todos têm seis prótons e a maior parte dos átomos existentes do elemento têm seis nêutrons, mas aproximadamente um por cento tem sete nêutrons e uma pequena fração tem oito nêutrons. Os isótopos não são separados na tabela periódica; eles são agrupados sob um único elemento. Elementos sem isótopos estáveis têm a massa atômica de seus isótopos mais estáveis, onde tais massas são mostradas entre parênteses.

Na tabela periódica padrão, os elementos estão listados em ordem crescente do número atômico (o número de prótons no núcleo atômico). Uma nova linha (período) é iniciada quando uma nova camada eletrônica tem o seu primeiro elétron. Colunas (grupo) são determinadas pela configuração eletrônica do átomo; elementos com o mesmo número de elétrons em um subcamada estão na mesma coluna (e.g. oxigênio e selênio são da mesma coluna porque ambos têm quatro elétrons na camada p mais externa). Elementos com propriedades químicas semelhantes normalmente caem no mesmo grupo da tabela periódica, embora no bloco f, e para alguns do bloco d, os elementos no mesmo período também tendem a ter propriedades similares. Assim, é relativamente fácil prever as propriedades químicas de um elemento se são conhecidas as propriedades dos elementos à sua volta.

Até 2016, a tabela periódica contém 118 elementos confirmados, do elemento 1 (hidrogênio) até o 118 (oganesson). Os elementos 113, 115, 117 e 118 foram confirmados oficialmente pela União Internacional de Química Pura e Aplicada (IUPAC) em dezembro de 2015. Os nomes propostos, nihonium (Nh), moscóvio (Mc), tennessine (Ts) e oganesson (Og) respectivamente, foram anunciados pela IUPAC em junho de 2016. Estes nomes não serão aprovados formalmente até o final da consulta pública de cinco meses que termina em novembro de 2016.

Os primeiros 94 elementos ocorrem naturalmente; os 24 remanescentes, do Amerício ao Ununóctio (95-118) ocorrem apenas quando sintetizados em laboratórios. Dos 94 elementos que ocorrem naturalmente, 84 são elementos primordiais e 10 ocorrem somente a partir do decaimento radioativo dos elementos primordiais. Nenhum elemento mais pesado que o Einstênio (elemento 99) foi observado em quantidades macroscópicas na forma pura, e nem o Astatino (elemento 85); o Frâncio (elemento 87) foi somente fotografado na forma de luz emitida em quantidades microscópicas (300.000 átomos).

Em 1789, Antoine Lavoisier publicou uma lista de 33 elementos químicos. Embora Lavoisier tenha agrupado os elementos em substâncias simples, metálicas, não metálicas e salificáveis ou terrosas, químicos passaram o século seguinte à procura de um esquema de construção mais precisa. Em 1829, Johann Wolfgang Döbereiner observou que muitos dos elementos poderiam ser agrupados em tríades (grupos de três) com base em suas propriedades químicas. Lítio, sódio e potássio, por exemplo, foram agrupados como sendo metais reativos frágeis. Döbereiner observou também que, quando organizados por peso atômico, o segundo membro de cada tríade tinha aproximadamente a média do primeiro e do terceiro. Isso ficou conhecido como a lei das tríades.

O químico alemão Leopold Gmelin trabalhou com esse sistema e por volta de 1843 ele tinha identificado dez tríades, três grupos de quatro, e um grupo de cinco. Jean Baptiste Dumas publicou um trabalho em 1857 descrevendo as relações entre os diversos grupos de metais. Embora houvesse diversos químicos capazes de identificar relações entre pequenos grupos de elementos, não havia ainda um esquema capaz de abranger todos eles.

Em 1869, o também químico alemão Julius Lothar Meyer publicou uma tabela com os 49 elementos conhecidos organizados pela valência, conceito desenvolvido por August Kekulé seis anos antes. A tabela revelava que os elementos com propriedades semelhantes frequentemente partilhavam a mesma valência. O químico inglês John Newlands publicou uma série de trabalhos em 1863 e 1866 que descreviam sua tentativa de classificar os elementos: quando listados em ordem crescente de peso atômico, semelhantes propriedades físicas e químicas retornavam em intervalos de oito, que ele comparou a oitavas de músicas. Esta lei das oitavas, no entanto, foi ridicularizada por seus contemporâneos.

O professor de química russo Dmitri Ivanovich Mendeleiev e Julius Lothar Meyer publicaram de forma independente as suas tabelas periódicas em 1869 e 1870, respectivamente. Ambos construíram suas tabelas de forma semelhante: listando os elementos de uma linha ou coluna em ordem de peso atômico e iniciando uma nova linha ou coluna quando as características dos elementos começavam a se repetir. O sucesso da tabela de Mendeleiev surgiu a partir de duas decisões que ele tomou: a primeira foi a de deixar lacunas na tabela quando parecia que o elemento correspondente ainda não tinha sido descoberto. Mendeleiev não fora o primeiro químico a fazê-lo, mas ele deu um passo adiante ao usar as tendências em sua tabela periódica para prever as propriedades desses elementos em falta, como o gálio e o germânio.

A segunda decisão foi ocasionalmente ignorar a ordem sugerida pelos pesos atômicos e alternar elementos adjacentes, tais como o cobalto e o níquel, para melhor classificá-los em famílias químicas. Com o desenvolvimento das teorias de estrutura atômica, tornou-se aparente que Mendeleiev tinha, inadvertidamente, listado os elementos por ordem crescente de número atômico.

Com o desenvolvimento das modernas teorias mecânica quântica de configuração de elétrons dentro de átomos, ficou evidente que cada linha (ou período) na tabela correspondia ao preenchimento de um nível quântico de elétrons. Na tabela original de Mendeleiev, cada período tinha o mesmo comprimento. No entanto, como os átomos maiores têm subníveis, tabelas modernas têm períodos cada vez mais longos na parte de baixo.

Em 1913, através do trabalho do físico inglês Henry G. J. Moseley, que mediu as frequências de linhas espectrais específicas de raios X de um número de 40 elementos contra a carga do núcleo ( $Z$ ), pôde-se identificar algumas inversões na ordem correta da tabela periódica, sendo, portanto, o primeiro dos trabalhos experimentais a ratificar o modelo atômico de Bohr. O trabalho de Moseley serviu para dirimir um erro em que a química se encontrava na época por desconhecimento: até então os elementos eram ordenados pela massa atômica e não pelo número atômico.

Nos anos que se seguiram após a publicação da tabela periódica de Mendeleiev, as lacunas que ele deixou foram preenchidas quando os químicos descobriram mais elementos químicos. O último elemento de ocorrência natural a ser descoberto foi o frâncio (referido por Mendeleiev como eka-césio) em 1939. A tabela periódica também cresceu com a adição de elementos sintéticos e transurânicos. O primeiro elemento transurânico a ser descoberto foi o netúnio, que foi formado pelo bombardeamento de urânio com nêutrons num ciclotron em 1939.

A tabela periódica relaciona os elementos em linhas denominadas períodos e colunas chamadas grupos ou famílias, em ordem crescente de seus números atômicos ( $Z$ ).

### Grupo

Um grupo ou família é uma coluna vertical na tabela periódica. Os grupos normalmente têm mais tendências periódicas significativas do que os períodos ou blocos, explicados abaixo. A teoria da mecânica quântica moderna da estrutura atômica explica a tendência no grupo pela proposição que elementos dentro do mesmo grupo normalmente têm a mesma configuração eletrônica em sua camada de valência. Consequentemente, elementos do mesmo grupo

tendem a ter uma química compartilhada e exibir uma clara tendência em suas propriedades com o aumento do número atômico. Entretanto, em algumas partes da tabela periódica, tais como no bloco d e bloco f, as similaridades horizontais podem ser tão importantes quanto, ou mais pronunciadas do que, as similaridades verticais.

Sob a convenção internacional de nomenclatura, os grupos são numerados de 1 a 18 a partir da coluna à esquerda (os metais alcalinos) para à direita (os gases nobres). Alguns dos grupos possuem nomes triviais não sistemáticos, conforme na tabela abaixo, embora raramente sejam utilizados. Os grupos do 3 ao 10 não possuem nomes triviais e são referidos simplesmente pelo número do grupo ou pelo nome do primeiro elemento do grupo (e.g. grupo do Escândio para os elementos do Grupo 3, uma vez que eles mostram menos similaridades e/ou tendências verticais).

Elementos no mesmo grupo tendem a mostrar padrões no raio atômico, energia de ionização e eletronegatividade. Do topo para baixo, o raio atômico dos elementos aumenta. Uma vez que existem mais níveis energéticos preenchidos, a camada de valência eletrônica está mais afastada do núcleo. A partir do topo, cada elemento tem uma energia de ionização menor porque é mais fácil remover um elétron pois estão conectados com menos firmeza. De modo similar, a partir do topo, um grupo tem a eletronegatividade menor devido ao aumento da distância entre os elétrons de valência e o núcleo. Porém, existem exceções nestas tendências como por exemplo nos elementos do Grupo 11 no qual a eletronegatividade aumenta a partir do topo dentro do grupo.

## **Períodos**

Um período é uma linha horizontal da tabela periódica. Embora os grupos tenham propriedades periódicas mais significativas, existem regiões onde a tendência horizontal é mais significativa do que a vertical, tais como no bloco f, onde os lantanídeos e actinídeos formam duas séries de grupos de elementos horizontais substanciais.

Os elementos no mesmo período apresentam tendências no raio atômico, energia de ionização, afinidade eletrônica e eletronegatividade. Da esquerda para a direita, através do período, o raio atômico normalmente diminui. Isto acontece porque a cada elemento é adicionado um próton e um elétron, o que traz o elétron para mais perto do núcleo. Esta diminuição do raio atômico também provoca o aumento da energia de ionização quando movendo da esquerda para a direita no período. Quanto mais firmemente conectado aos

seus elétrons, mais energia é necessária para removê-los. A eletronegatividade aumenta da mesma maneira que a energia de ionização por causa da atração exercida nos elétrons pelo núcleo. A afinidade eletrônica também possui uma leve tendência ao longo do período. Os metais à esquerda no período normalmente possuem uma afinidade eletrônica menor que os não metais à direita no período, com exceção dos gases nobres.

## **Blocos**

Regiões específicas da tabela periódica podem ser referidas como blocos em reconhecimento da sequência na qual as camadas eletrônicas dos elementos são preenchidas. Cada bloco é nomeado de acordo com a subcamada no qual o local fictício do "último" elétron. O bloco s compreende os dois primeiros grupos (metais alcalinos e alcalinos terrosos) assim como o hidrogênio e o hélio. O bloco p compreende os últimos seis grupos, que são os grupos 13 ao 18 na numeração da IUPAC e contém, entre outros elementos, todos os metalóides. O bloco d compreende os grupos 3 ao 12 e contém todos os metais de transição. O bloco f, às vezes mostrado abaixo do resto da tabela, não tem numeração de grupo e compreende os lanatânídeos e actinídeos.

## **Metais, metalóides e ametais**

De acordo com as propriedades físicas e químicas, os elementos podem ser classificados em três categorias maiores de metais, metalóides e ametais. Os metais são geralmente brilhantes, sólidos altamente condutores que formam ligas com um ou outro sal como compostos iônicos com ametais (exceto os gases nobres). A maioria dos ametais são coloridos e gases isolantes incolores; ametais que formam compostos com outros ametais apresentam ligações covalentes. Entre metais e não metais estão os metalóides, que possuem propriedades mistas ou intermediárias.

O metal e ametal pode ser ainda classificado em subcategorias que demonstram uma graduação da propriedade metálica para a não-metálica, quando indo da esquerda para a direita no período. Os metais são subdivididos em metais alcalinos, metais alcalinos terrosos, lanatânídeos e actinídeos, através dos metais de transição, e terminando nos metais pós transição que são fracos quimicamente e fisicamente. Os ametais são simplesmente divididos nos ametais poliatômicos, que são essencialmente os ametais; e os gases nobres monoatômicos, que são não-metais e praticamente inertes. Também

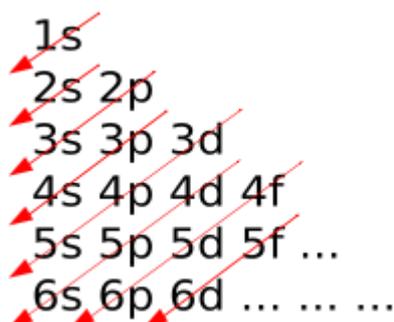
são conhecidos grupos especializados tais como, por exemplo, os metais refratários e os metais nobres que são subconjuntos dos metais de transição e são ocasionalmente destacados.

A alocação dos elementos em categorias ou subcategorias baseada nas propriedades compartilhadas é imperfeita. Existe um espectro de propriedades dentro de cada categoria e não é difícil encontrar sobreposições nos limites, conforme acontece com a maioria dos esquemas de classificação.

O berílio, por exemplo, é classificado como um alcalino terroso embora sua química anfotérica e tendência a formar compostos covalentes seja característica dos metais pós-transição. O radônio ainda é classificado como um ametal e gás nobre embora possua química catiônica que é uma característica metálica. São possíveis outros esquemas de classificação tais como a divisão dos elementos nas categorias de ocorrência mineralógica ou nas estruturas cristalinas. A categorização dos elementos desta maneira iniciou em 1869 quando Hinrichs escreveu que uma simples linha de limite poderia ser desenhada na tabela periódica para mostrar elementos que tem propriedades similares tais como os metais e ametais, ou os elementos gasosos.

### Propriedades periódicas

#### Configuração eletrônica



Ordem aproximada em que as camadas e subcamadas são arranjadas pelo nível de energia de acordo com o princípio de Aufbau

A configuração eletrônica ou organização dos elétrons orbitando átomos neutros mostra um padrão recorrente ou periodicidade. Os elétrons ocupam uma série de níveis eletrônicos (numerados nível 1, nível 2, e assim em diante). Cada nível consiste de um ou mais subníveis (nomeados s, p, d, f e g). Conforme o número atômico aumenta, os elétrons progressivamente ocupam estes níveis e subníveis de acordo com o princípio de Aufbau ou regra de ordenamento energético, conforme demonstrado no diagrama. A configuração

eletrônica para o neônio, por exemplo, é  $1s^2 2s^2 2p^6$ . Com o número atômico de dez, o neônio tem dois elétrons no primeiro nível e oito no segundo nível—dois ocupam o subnível s e seis o subnível p. Em termos de tabela periódica, a primeira vez que um elétron ocupa um novo nível corresponde ao início de um novo período, estas posições sendo ocupadas pelo hidrogênio e os metais alcalinos.

### **Propriedades da tabela periódica (as setas indicam aumento)**

Uma vez que as propriedades de um elementos são na maioria das vezes determinada pela configuração eletrônica, da mesma forma as propriedades dos elementos mostram um padrão recorrente ou periódico com alguns mostrados no diagrama abaixo para o raio atômico, energia de ionização e afinidade eletrônica. Foi esta periodicidade das propriedades, manifestação que foi bem observada antes da teoria atual ser estabelecida, que levou a formulação da lei periódica (as propriedades dos elementos ocorrem em intervalos variados) e a formulação das primeiras tabelas periódicas.

### **Raio atômico**

Número atômico plotado contra o raio atômicos

O raio atômico varia de um modo previsível e explicável através da tabela periódica. Por exemplo, o raio geralmente diminui ao longo de cada período da tabela, a partir dos metais alcalinos para os gases nobres; e aumenta dentro do grupo de cima para baixo. O raio aumenta significativamente entre o gás nobre no fim de cada período e o metal alcalino no período seguinte. Esta propriedade (e de várias outras propriedades físicas e químicas dos elementos) pode ser explicada pela teoria da configuração eletrônica do átomo; elas fornecem evidências importantes para o desenvolvimento e confirmação da teoria quântica.

Os elétrons no subnível 4f, que são progressivamente preenchidos a partir do Cério (elemento 58) até o Itérbio (elemento 70), não são efetivo na blindagem do aumento da carga nuclear para os subníveis posteriores. Os elementos subsequentes aos lantanídeos têm raio atômico que são menores do que o esperado e são quase idênticos ao raio atômico do elemento imediatamente acima destes. Deste modo o Háfnio tem praticamente o raio atômico (e química) do zircônio, e o tântalo do nióbio e assim por diante. Este

fenômeno é conhecido como contração dos lantanídeos. O efeito desta contração é visível até a platina (elemento 78), no qual após este é mascarado por efeitos relativísticos conhecidos como o efeito do par inerte. A contração do bloco d, que é um efeito similar entre o bloco d e p, é menos pronunciado do que a contração dos lantanídeos mas ocorre pelo mesmo motivo.

### **Energia de ionização**

Energia de ionização: cada período começa com um valor mínimo para os alcalinos terrosos e termina com um máximo para os gases nobres

A primeira energia de ionização é a energia necessária para remover um elétron do átomo, a segunda energia de ionização é a energia necessária para remover um segundo elétron, e assim por diante. Para um dado átomo, a energia de ionização aumenta com o nível de remoção de elétrons. Para o magnésio, por exemplo, a primeira energia é de 738 kJ/mol e a segunda de 1450 kJ/mol. Elétrons com orbitais mais próximos experimentam uma atração da força eletrostática maior, portanto é necessário mais energia para serem removidos. A ionização fica ainda maior na parte superior à direita da tabela periódica.

Saltos grandes na sucessão de energia de ionização molar ocorrem quando removendo um elétron numa configuração completa de nível eletrônico (gás nobre). Novamente, para o magnésio, para as duas primeiras energias de ionização dadas acima correspondem a remoção de dois elétrons 3s, e a terceira energia é de 7730 kJ/mol que é muito superior pois remove um elétron do orbital 2p que tem configuração similar ao do neon para o  $Mg^{2+}$ . Saltos similares correm em energias de ionização de átomos no terceiro período.

### **Eletronegatividade**

Gráfico mostrando o aumento da eletronegatividade com o número crescent de grupos

A eletronegatividade é a tendência de um átomo de atrair um elétron. Proposta inicialmente por Linus Pauling em 1932, é afetada tanto pelo número atômico quanto pela distância entre os elétrons de valência e o núcleo. Em geral, ela aumenta da esquerda para direita ao longo do período, e de baixo para cima no grupo. Portanto, o flúor é o elemento mais eletronegativo, enquanto o césio é o com menor valor, pelo menos entre os elementos com dados substanciais.

Existem algumas exceções para esta regra geral. O gálio e o germânio têm eletronegatividades superiores ao alumínio e silício, respectivamente, devido a contração do bloco d. Elementos do quarto período imediatamente após a primeira linha dos metais de transição têm um raio atômico surpreendentemente pequeno porque os elétrons 3d não são efetivos na blindagem do aumento da carga nuclear, e volumes atômicos menores implicam em uma eletronegatividade superior. O chumbo tem uma eletronegatividade superior anômala, particularmente quando comparado com o tálio e o bismuto, que parece ser um artifício da seleção de dados e métodos de cálculo disponível ao invés do método de Pauling de mostrar a tendência periódica destes elementos.

### **Afinidade eletrônica**

Dependência da afinidade eletrônica pelo número atômico. Os valores geralmente aumentam nos grupos, a partir da esquerda e culminando nos halogênios e após e reduzindo drasticamente com os gases nobres. Exemplos de picos localizados vistos no hidrogênio, os metais alcalinos e elementos do grupo 11 são causados pela tendência de completar o subnível s (com o subnível 6s do ouro sendo após estabilizado por efeitos relativísticos e a presença de um subnível 4f preenchido). Exemplos de picos localizados nos metais alcalinos terrosos, nitrogênio, fósforo, manganês e rênio são causados pelos subníveis s, ou os semi-preenchidos subníveis p ou d.

A afinidade eletrônica de um átomo é a quantidade de energia envolvida quando um elétron é adicionado a um átomo no estado gasoso. Embora a afinidade eletrônica varie consideravelmente, existem alguns padrões periódicos. Geralmente, ametais têm valores de afinidade eletrônica positivos superiores aos dos metais. O cloro atrai com mais força o elétron extra, e os gases nobres não tiveram seus dados mensurados de forma conclusiva portanto podem ter ou não um valor levemente negativo.

A afinidade eletrônica geralmente aumenta dentro de um período. Isto é causado pelo preenchimento do camada de valência do átomo; um átomo do grupo 17 libera mais energia do que um do grupo 1 ao ganhar um elétron porque preenche esta camada e então se torna mais estável.

Dentro do grupo, a afinidade eletrônica diminui com o aumento do número de períodos. O elétron extra estaria entrando em um orbital mais afastado do núcleo e como tal seria menos atraído pelo núcleo liberando menos energia quando adicionado. Todavia, com o aumento do número do período, aproximadamente um terço dos elementos são anômalos, com os elementos

mais pesados tendo uma afinidade eletrônica maior que os congêneres mais leves. Isto se deve a blindagem ineficiente dos elétrons nos níveis d e f. Uma diminuição uniforme da afinidade eletrônica só é aplicável aos átomos do grupo 1.

### **Característica metálica**

Quanto menor os valores de energia de ionização, eletronegatividade e afinidade eletrônica, maior a característica metálica do elemento. De modo contrário, a característica não-metálica aumenta com os valores destas propriedades. Dada a tendência periódica destas propriedades, a característica metálica tende a diminuir ao longo do período e, com algumas irregularidades devido ao fraco efeito de blindagem dos elétrons f e d e efeitos relativísticos, tende a aumentar ao longo do grupo (ou coluna ou família). Deste modo, os elementos mais metálicos (tais como o cézio e o frâncio) são encontrados na parte de baixo à esquerda de uma tabela periódica tradicional e os elementos mais ametálicos (oxigênio, flúor e cloro no topo à direita). A combinação das tendências horizontais e verticais na característica metálica explica o formato em escada da linha dividindo os metais e ametais que é encontrada em algumas tabelas, e a prática de categorizar vários elementos adjacentes nesta linha, ou elementos adjacentes a estes elementos como metaloides.

### **Tabelas periódicas diferentes**

Existem três variações principais da tabela periódica, cada uma diferindo na constituição dos elementos do grupo 3. O escândio e o ítrio são mostrados como os dois primeiros membros deste grupo; e a diferença depende da identidade dos membros remanescentes.

Grupo 3 é o Sc, Y, e La, Ac. O lantânio (La) e o actínio (Ac) ocupam as duas posições abaixo do ítrio, sendo esta a variante mais comum. Isto enfatiza as similaridades nas propriedades periódicas ao descer nos grupos 1, 2 e 3, ao custo de descontinuidades nas propriedades entre os grupos 3 e 4 e fragmentando os lantanídeos e actinídeos.

Group 3 é o Sc, Y, e Lu, Lr. O lutécio (Lu) e o laurêncio (Lr) ocupam as duas

posições abaixo do ítrio. Esta variante mantém as quatorze colunas do bloco f e fragmenta os lantanídeos e actinídeos. Isto enfatiza as similaridades nas propriedades periódicas entre o grupo 3 e os seguintes ao custo de descontinuidades nas propriedades entre o grupo 2 e 3.

Grupo 3 é o Sc, Y, e 15 lantanídeos e 15 actinídeos. As duas posições abaixo do ítrio contêm os lantanídeos e actinídeos (possivelmente um marcador de nota de rodapé). Esta variação enfatiza as similaridades na química dos elementos lantanídeos (La–Lu), ao custo da ambiguidade no qual os elementos que ocupam o grupo 3 abaixo do ítrio parecem ser uma coluna de 15 blocos f (podem existir somente 14 elementos em uma linha do bloco f).

Estas três variações são originadas da dificuldade histórica de colocar os lantanídeos na tabela periódica, e argumentos como onde os elementos do bloco f começam e terminam. Tem sido questionado que tais argumentos são uma prova de que, é um erro separar o sistema periódico em blocos delimitados. Do mesmo modo, algumas versões com os dois marcadores tem sido criticadas por implicar que todos os quinze lantanídeos ocupam uma única célula ou estão abaixo do ítrio, em desacordo com o princípio básico de um elemento para cada espaço na tabela.

Em Química, os critérios utilizados para a organização dos elementos químicos foram estabelecidos ao longo do tempo. No ano de 1869, Dimitri Mendeleev iniciou os estudos a respeito da organização da tabela periódica através de um livro sobre os cerca de 60 elementos conhecidos na época, cujas propriedades ele havia anotado em fichas separadas.

Ao trabalhar com esses dados ele percebeu que organizando os elementos em função da massa de seus átomos, determinadas propriedades se repetiam diversas vezes, e com uma mesma proporção, portanto era uma variável periódica. Lembrando que periódico é tudo o que se repete em intervalos de tempo bem definidos, como é o caso das estações do ano e das fases da lua, por exemplo.

Ela foi criada com o intuito de organizar as informações já constatadas a fim de facilitar o acesso aos dados. Quando foi proposta muitos elementos ainda não haviam sido descobertos, muito embora seu princípio seja seguido até hoje com 118 elementos. Alguns outros modelos de tabela vêm sendo propostos, como por exemplo a que apresenta forma de espiral proposta por Philip Stewart com base na natureza cíclica dos elementos químicos, porém a mais utilizada ainda é a de Mendeleev.

Dimitri Ivanovich Mendeleev nasceu na Sibéria e era professor da Universidade de São Petersburgo quando descobriu a lei periódica. O elemento de número atômico 101 da tabela periódica tem o nome em homenagem a ele, o Mendelévio.

A tabela tem os elementos químicos dispostos em ordem crescente de número atômico e são divididos em grupos (ou famílias) devido a características que são comuns entre eles. Cada elemento químico é representado por um símbolo, por exemplo a prata é representada por Ag devido a seu nome no latim argentum. Cada elemento possui ao lado de seu símbolo o número atômico e o número de massa.

### **Classificação dos elementos**

**Metais:** São bons condutores de calor e eletricidade. São sólidos nas CNTP (com exceção do mercúrio), além de maleáveis e dúcteis.

**Não metais:** São maus condutores de corrente elétrica e calor. Podem assumir qualquer estado físico na temperatura ambiente.

**Gases nobres:** Apresentam baixa reatividade, sendo até pouco tempo considerados inertes.

Os elementos podem ser classificados em representativos ou de transição (interna e externa). Os representativos são aqueles cuja distribuição eletrônica termina em s ou p. Os elementos de transição externa são aqueles cuja distribuição acaba em d, e os de transição interna acabam em f. A localização de um elemento na tabela periódica pode ser indicada pelo seu grupo e seu período. Os elementos de transição interna são os que se encontram nas duas linhas bem embaixo na tabela e na verdade é como se estivessem localizados no sexto e sétimo período do grupo três.

Cada linha no sentido horizontal da tabela periódica representa um período. Eles são em número de sete, e o período em que o elemento se encontra indica o número de níveis que possui. Por exemplo o sódio (Na) está no período três, o que significa que o seu átomo possui três camadas eletrônicas.

Já os grupos são as linhas verticais que apresentam elementos químicos que compartilham propriedades. Por exemplo o flúor (F) e o cloro (Cl) estão no grupo 17 (ou 7A) por possuírem alta tendência de receber elétrons, o que chamamos de eletronegatividade. Alguns grupos possuem nomes específicos como os listados abaixo e os demais recebem o nome do primeiro elemento de seu grupo.

Grupo 1: Metais alcalinos: esses elementos são muito reativos principalmente com a água. Esta reatividade aumenta conforme aumenta o número atômico e o raio do átomo. Todos os elementos desse grupo são eletropositivos, metais bons condutores de eletricidade, e formam bases fortes. São sólidos a temperatura ambiente, apresentam brilho metálico e quando expostos ao ar oxidam facilmente. São utilizados na iluminação no caso das lâmpadas de sódio, na purificação de metais e na fabricação de sabões sendo combinados com a gordura.

Grupo 2: Metais alcalino-terrosos: Possuem esse nome por serem geralmente encontrados na terra. São bastante reativos, porém menos que os metais do grupo 1. Também são eletropositivos e são mais duros e densos do que os metais alcalinos. São utilizados em ligas metálicas como é o caso por exemplo do Berílio (Be), na composição do gesso e do mármore sendo o caso do cálcio (Ca) e em fogos de artifício magnésio (Mg) e estrôncio (Sr).

Grupo 16 (ou 6A): Calcogênios: Os elementos desse grupo recebem esse nome derivado do grego que significa “formadores de cobre”. Neste grupo pode-se perceber facilmente analisando todos os elementos do grupo a presença de características metálicas e não metálicas. Os elementos mais importantes deste grupo são o oxigênio (O) e o enxofre (S) sendo o primeiro o gás utilizado inclusive em nossa respiração e o último é responsável inclusive pelo fenômeno da chuva ácida.

Grupo 17 (ou 7A): Halogênios: São os elementos mais eletronegativos da tabela periódica, ou seja, possuem a tendência de receber elétrons em uma ligação. Podem se combinar com quase todos os elementos da tabela periódica. O flúor por exemplo possui aplicação na higiene bucal.

Grupo 18 (ou 8A): Gases nobres: possuem essa intitulação devido a ser constatado antigamente que não possuíam tendência alguma a formarem ligações. Isto ocorre devido à estabilidade de seus orbitais da camada mais externa completamente preenchidos. Hoje alguns compostos conseguiram ser preparados com estes elementos e incluem geralmente o Xenônio (Xe) que possui a primeira energia de ionização muito próxima do oxigênio.

A Química Orgânica recebeu inicialmente esse nome para descrever substâncias extraídas de organismos vivos. Acreditava-se que elas só podiam ser produzidas em organismos vegetais e animais, mas nunca em laboratório.

Entretanto, provou-se que o homem conseguia sim sintetizar compostos orgânicos em laboratório, e então a definição de Química Orgânica mudou para:

“Ramo da Química que estuda a maioria dos compostos formados pelo elemento carbono”.

Visto que o carbono é tetravalente, podendo realizar quatro ligações de diferentes maneiras, com átomos de outros elementos ou com átomos do próprio carbono, existem milhões de seus compostos. Uma quantidade muito superior do que a de compostos inorgânicos conhecidos atualmente.

A química orgânica é um ramo da química que envolve o estudo das estruturas, composição e síntese de compostos contendo carbono. No entendimento desta forma de química, é importante notar que todas as moléculas orgânicas incluem não só carbono, mas também hidrogênio.

Embora seja verdade que os compostos orgânicos podem conter outros elementos, a ligação entre carbono e hidrogênio é o que torna um composto orgânico.

Originalmente, este campo foi definido como o estudo de compostos criados por organismos vivos, mas sua definição foi ampliada para incluir substâncias artificialmente sintetizadas também. Antes de 1828, todos os compostos orgânicos foram obtidos a partir de organismos vivos. Os cientistas não acreditavam que fosse possível sintetizar compostos orgânicos a partir de compostos inorgânicos, e muitos que tentaram fazê-lo, falharam.

Em 1828, contudo, a ureia foi feita a partir de substâncias inorgânicas, abrindo o caminho para uma nova definição de química orgânica.

Existem milhões de compostos orgânicos conhecidos, e além de serem abundantes, também são únicos. Isso ocorre porque os átomos de carbono têm a capacidade de formar laços fortes com muitos elementos diferentes. Os átomos de carbono também são capazes de se ligar covalentemente a outros átomos de carbono, ao mesmo tempo que formam ligações fortes com outros átomos não metálicos. Quando os átomos de carbono se unem, podem formar cadeias que consistem em milhares de átomos, assim como anéis, esferas e tubos.

Muitas pessoas consideram a química orgânica ser muito complicada e sem relação com a vida diária.

Embora o estudo desta disciplina pode ser complexa, é muito importante para a vida cotidiana. Na verdade, compostos orgânicos são uma parte de tudo, desde os alimentos que as pessoas comem para os produtos que eles usam. Eles são

importantes na criação de vestuário, plásticos, fibras, medicamentos, inseticidas, produtos químicos derivados do petróleo, e uma longa lista de produtos utilizados para apoiar a vida e torná-lo mais conveniente.

Este campo de estudo é importante não só para aqueles que estão interessados em carreiras científicas, mas para todos os indivíduos vivos hoje e para aqueles que serão nascidos no futuro.

É fundamental no desenvolvimento de novos produtos e na melhoria daqueles em que as pessoas se tornaram dependentes.

Cada ano, os químicos orgânicos fazem descobertas que são úteis na melhoria de medicamentos, ajudando o crescimento agrícola, a compreensão do corpo humano, e realizando inúmeras tarefas importantes para a pessoa humana.

A química orgânica é um subcampo da química que envolve o estudo científico da estrutura, propriedades e reações de compostos orgânicos e de materiais orgânicos, ou seja, a matéria em suas várias formas que contêm átomos de carbono.

A química orgânica é o estudo da estrutura, propriedades, composição, reações e preparação de compostos contendo carbono, que incluem não só hidrocarbonetos mas também compostos com qualquer número de outros elementos, incluindo o hidrogênio (a maioria dos compostos contém pelo menos um átomo de carbono-hidrogênio Ligação), azoto, oxigênio, halogêneos, fósforo, silício e enxofre.

Este ramo da química foi originalmente limitado a compostos produzidos por organismos vivos, mas foi ampliado para incluir substâncias humanas, tais como plásticos.

A gama de aplicação de compostos orgânicos é enorme e também inclui, mas não se limita a, produtos farmacêuticos, petroquímicos, alimentos, explosivos, tintas e cosméticos.

A Química Orgânica está presente em qualquer atividade de nossas vidas. Nesse momento, por exemplo, ao ler esse texto, tudo está sendo mediado por compostos orgânicos. Para conseguir enxergar, seus olhos estão utilizando um composto orgânico (o cis-retinal) para converter a luz em um impulso nervoso.

Quando você mexe no "mouse", no teclado, enfim, faz qualquer movimento (até dormir) o seu organismo está fazendo uma reação química para transformar a glicose em energia. Para que você possa raciocinar e entender esse texto ou perceber o mundo, os impulsos nervosos são transmitidos entre os neurônios

através da intermediação de moléculas orgânicas (neurotransmissores, como, por exemplo, a serotonina).

A química orgânica nome veio da palavra organismo.

Antes de 1828, todos os compostos orgânicos tinham sido obtidos a partir de organismos ou seus restos.

A filosofia científica na época era que a síntese de compostos orgânicos só poderia ser produzida dentro da matéria viva enquanto compostos inorgânicos foram sintetizados a partir de matéria não-viva.

Em 1828, um químico alemão Friedrich Wöhler (1800-1882) surpreendeu a comunidade científica usando a cianato composto inorgânico de amônio,  $\text{NH}_4\text{OCN}$  para sintetizar uréia,  $\text{H}_2\text{NCONH}_2$ , uma substância orgânica encontrada na urina de muitos animais.

Hoje, os químicos consideram os compostos orgânicos como aqueles que contêm carbono e um ou mais em outros elementos, na maioria das vezes hidrogênio, oxigênio, nitrogênio, enxofre ou os halogênios, mas às vezes outros também.

A Química orgânica é definida como a química do carbono e seus compostos.

A química orgânica é o estudo das estruturas, propriedades e comportamentos, de compostos que contêm ligações carbono-hidrogênio.

Se você acha que química orgânica é um monstro de sete cabeças, agora, olhando por um novo ângulo, verá como vai ficar mais fácil compreendê-la.

A química orgânica exerce grande participação no nosso cotidiano. Grande parte dos compostos produzidos em nosso corpo são orgânicos por exemplo a uréia e a glicose. Não apenas em nós, como também em todos os seres vivos, sejam eles vegetais ou animais.

Também a encontramos como combustível, na produção de tinta e sabões, até mesmo na criação de um novo composto que pode ser usado para salvar vidas.

## **A Química dos Compostos de Carbono**

A química dos compostos de carbono é, freqüentemente, estudada sob o nome de Química Orgânica, como se fosse um ramo especial da Química. Na realidade, esse nome tem origens históricas e razões didáticas.

Dava-se o nome de Química Orgânica à química dos compostos produzidos pelos animais e vegetais. Acreditava-se naquela época que tais compostos se formavam pela ação de um misterioso princípio chamado de força vital.

Atualmente a Química Orgânica tem um significado completamente diverso, sendo definida em função de seu objetivo de estudo: os compostos de carbono. Hoje deveríamos denomina-la de Química dos Compostos de Carbono.

É importante ressaltar que vamos fazer uso constante das ligações químicas ao explicar a estrutura e as propriedades dos compostos orgânicos. Desta forma é necessário recordar rapidamente as ligações iônicas e covalentes e as condições que levam ao surgimento de moléculas polares e apolares. Devem ser caracterizadas as ligações do carbono nos compostos orgânicos e discutidos os vários tipos de cadeias carbônicas.

## **Hidrocarboneto**

Na química, um hidrocarboneto é um composto químico constituído por átomos de carbono e de hidrogênio unidos tetraedricamente por ligação covalente assim como todos os compostos orgânicos.

Os hidrocarbonetos naturais são compostos químicos constituídos apenas por átomos de carbono (C) e de hidrogênio (H), aos quais se podem juntar átomos de oxigênio (O), azoto ou nitrogênio (N) e enxofre (S), dando origem a diferentes compostos de outros grupos funcionais.

São conhecidos alguns milhares de hidrocarbonetos. As diferentes características físicas são uma consequência das diferentes composições moleculares. Contudo, todos os hidrocarbonetos apresentam uma propriedade comum: oxidam-se facilmente liberando calor.

Os hidrocarbonetos naturais formam-se a grandes pressões no interior da terra (abaixo de 150 km de profundidade) e são trazidos para zonas de menor pressão através de processos geológicos, onde podem formar acumulações comerciais (petróleo, gás natural, carvão etc). As moléculas de hidrocarbonetos, sobretudo as mais complexas, possuem alta estabilidade termodinâmica. Apenas o metano, que é a molécula mais simples (CH<sub>4</sub>), pode se formar em condições de pressão e temperatura mais baixas. Os demais

hidrocarbonetos não são formados espontaneamente nas camadas superficiais da terra.

### **Cadeias carbônicas do hidrocarboneto**

Os hidrocarbonetos tem uma série de cadeias sendo divididos em:

hidrocarbonetos alifáticos: neles, a cadeia carbônica é acíclica (ou seja, aberta), sendo subdividido em:

alcanos

alcenos

alcinos

alcadienos

alcadiinos

hidrocarbonetos cíclicos: possuem pelo menos uma cadeia carbônica fechada, subdivididos em:

cicloalcanos ou ciclanos

cicloalcenos ou ciclenos

cicloalcinos ou ciclinos

aromáticos, que possuem pelo menos um anel aromático (anel benzênico) além de suas outras ligações.

Hidrocarbonetos policíclicos de Von Baeyer

### **Ligações entre os hidrocarbonetos**

Os hidrocarbonetos tem uma série de divisões sendo:

hidrocarbonetos saturados, englobando alcanos e cicloalcanos, que não possuem ligações dupla, tripla ou aromática;

hidrocarbonetos insaturados, que possuem uma ou mais ligações dupla ou tripla entre átomos de carbono (entre eles

os alcenos, alcadienos e cicloalcenos - com ligação dupla; alcinos - com ligações tripla -; e aromáticos)

O número de átomos de hidrogênio em hidrocarbonetos pode ser determinado, se o número de átomos de carbono for conhecido, utilizando as seguintes equações:

Alcanos:  $C_nH_{2n+2}$

Alcenos:  $C_nH_{2n}$

Alcinos:  $C_nH_{2n-2}$

Ciclanos:  $C_nH_{2n}$

Ciclenos:  $C_nH_{2n-2}$

Hidrocarbonetos geralmente líquidos geologicamente extraídos são chamados de petróleo (literalmente "óleo de pedra") ou óleo mineral, enquanto hidrocarbonetos geológicos gasosos são chamados de gás natural. Todos são importantes fontes de combustível.

Hidrocarbonetos são de grande importância econômica porque constituem a maioria dos combustíveis minerais (carvão, petróleo, gás natural, etc.) e biocombustíveis como o plásticos, ceras, solventes e óleos. Na poluição urbana, esses compostos - juntamente com  $NO_x$  e a luz solar - contribuem para a formação do ozônio troposférico.

### **Composto Alifático**

Em química orgânica, os compostos orgânicos constituídos de carbono e hidrogênio são divididos em duas classes:

aromáticos, que contêm anéis benzênicos ou anéis de átomos similares;

alifáticos (IPA: [ˌæləˈfæɪtɪk]; G. aleiphar, gordura, óleo), sinônimos de cadeias abertas ou acíclicas.

Os compostos alifáticos podem ser:

cíclicos, como o cicloexano

acíclicos, como o hexano.

Podem também ser:

saturados, como o hexano

insaturados, como o hexeno.

Quanto a composição da cadeia, os compostos alifáticos podem ser classificados ainda em:

homoalifático, quando há uma continuidade de átomos de carbono ligados formando a cadeia alifática, sem um único átomo diferente do carbono quebrando tal continuidade

heteroalifático, quando há uma descontinuidade dos átomos de carbono na cadeia, como no caso dos éteres, onde pode haver um ramo alifático contínuo, homoalifático, de um lado, a interposição de um átomo de oxigênio e depois a cadeia continua, apenas com átomos de carbono.

Hidrocarbonetos alifáticos, especificamente, são hidrocarbonetos com átomos de carbono estruturais em cadeias abertas e fechadas (cíclicas), não aromáticas. Podem ser alcanos, alcenos, alcinos ou alcadienos, e ainda outras combinações, se as ligações entre esses átomos forem respectivamente simples, duplas ou triplas.

### **Hidrocarboneto cíclico**

Hidrocarbonetos

cíclicos são hidrocarbonetos com átomos de carbono estruturais em cadeias fechadas (cíclicas). Podem ser cicloalcanos, cicloalcenos ou aromáticos.

### **Hidrocarbonetos policíclicos de Von Baeyer**

Sistemas de hidrocarbonetos alifáticos saturados constituídos por dois ou mais ciclos, com dois ou mais átomos em comum, são chamados de Hidrocarbonetos Policíclicos.

Levam o nome de seu precursor, o químico holandês Von Baeyer.

São geralmente obtidos através de reações químicas entre dois hidrocarbonetos cíclicos, em alta pressão e temperatura.

## Classificação

Podem ser classificados em Sistemas Bicíclicos, Tricíclicos, Tetracíclicos, Pentacíclicos, etc.

A classificação é baseada no número de "pontes" de hidrocarbonetos presentes na cadeia.

### As Pontes de Hidrocarbonetos

As chamadas pontes de Hidrocarbonetos são radicais bivalentes, ou seja, radicais que fazem duas ligações, ou que possuem dois extremos. Cita-se a exemplo:

Propadiil(C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>)

-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-

Etadiil ou vinidil(C<sub>3</sub>H<sub>2</sub>)

-CH=C=CH-

### Nomenclatura

A Nomenclatura Oficial da IUPAC para estes sistemas dá se pelo prefixo Bi, Tri, Tetra, etc; dependendo do número de pontes no sistema seguido pela palavra ciclo, um colchete indicando o número de carbonos a direita da ponte principal, a esquerda da ponte principal, na ponte principal e nas pontes secundárias, respectivamente, com a terminação do nome do hidrocarboneto. Por exemplo:

Biciclo[3.2.1]Octano

Triciclo[5.3.3.1]Tetradec-3-en-5-ino

## Hidrocarboneto aromático

Hidrocarbonetos aromáticos (também denominados arenos) são compostos caracterizados por apresentar ligações sigma e elétrons pi deslocalizados entre átomos de carbono em uma cadeia fechada. Em contraste, hidrocarbonetos alifáticos não possuem essa deslocalização. O termo "aromático" foi designado

antes do mecanismo físico determinante da Aromaticidade fosse descoberto; o termo foi cunhado pelo simples fato que vários compostos possuem fortes odores. A configuração de seis carbonos em compostos aromáticos é conhecido como anel benzênico, a partir do benzeno (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>) que é o mais simples dos aromáticos. Hidrocarbonetos aromáticos podem ser monocíclicos ou policíclicos.

Alguns compostos não baseados em benzeno são chamados de heteroarenos, e seguem a Regra de Hückel (para anéis monocíclicos: o número de elétrons pi é igual a  $4n + 2$ , onde  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ) também são compostos aromáticos. Neles, pelo menos um carbono é substituído por um heteroátomo como Oxigênio, Nitrogênio ou Enxofre.

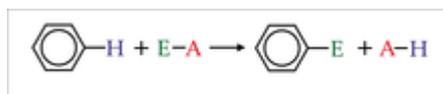
Existem poucos hidrocarbonetos que possuem aromaticidade além do benzeno e compostos relacionados (anéis fundidos). A aromaticidade também ocorre em outras cadeias cíclicas. O furano, por exemplo, é um composto aromático em que o anel é formado por 4 átomos de carbono e um de oxigênio. Quando apresentam um só grupamento, o nome desse procede o nome da cadeia principal.

Quando apresentar mais de um grupamento a numeração deve começar por um dos carbonos ramificados e prosseguir de tal forma que os grupamentos estejam nos carbonos de menor número possível. Uma nomenclatura típica é: orto, meta e para (posições 1,2/1,3/1,4 respectivamente).

Esses compostos apresentam uma nomenclatura particular, que não segue as regras utilizadas na nomenclatura dos outros hidrocarbonetos. Além disso, não existe uma fórmula geral para todos os aromáticos.

## Reações de compostos aromáticos

### Reações de substituição aromática eletrolítica



São reações de substituição em arenos envolvendo a presença de reagentes eletrolíticos (representado pela letra E na imagem 1 a seguir, e pode representar um cátion ou qualquer espécie com carga positiva parcial) responsáveis pela inserção direta de grupos como nitro (NO<sub>2</sub>), halogênios ou acilas (SOLOMONS e FRYHLE, 2001).

A região onde há a presença de elétrons  $\pi$  é bastante suscetível a um ataque eletrofílico, porém os arenos, ao contrário dos alcenos (que realizam reações de adição na presença de um eletrófilo), realizam reações de substituição, pois assim, conseguem readquirir suas propriedades aromáticas após a introdução do grupo no anel (SOLOMONS e FRYHLE, 2001).

### Halogenação

Introdução de um halogênio (X) ao composto aromático, como mostrado de maneira resumida imagem 2 a seguir:

A reação não ocorre sem a presença de um ácido de Lewis que é o responsável por liberar no meio reacional o eletrófilo, no caso, um cátion do halogênio. Os ácidos mais comuns são  $\text{FeBr}_3$  e  $\text{FeCl}_3$  (SOLOMONS e FRYHLE, 2001).

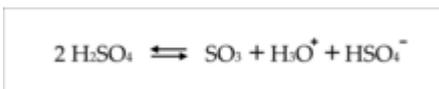
### Nitração

Introdução de um grupo nitro ( $\text{NO}_2$ ) ao composto aromático, como mostrado de maneira resumida na imagem 3.

A reação ocorre mais rapidamente à presença do ácido sulfúrico concentrado por aumentar a concentração do eletrófilo ( $\text{NO}_2^-$ ) no meio reacional (SOLOMONS e FRYHLE, 2001).

### Sulfonação

Introdução de um grupo hidrogenossulfito ( $\text{HSO}_3^-$ ) ao composto aromático, como mostrado de maneira resumida na imagem 4.



Em uma solução de ácido sulfúrico concentrado, ocorre o seguinte equilíbrio, ilustrado na imagem 5.

O SO<sub>3</sub> formado no equilíbrio atua como eletrófilo na reação, por isso a reação ocorre mais rapidamente em ácido sulfúrico fumegante (ácido sulfúrico com uma concentração maior de SO<sub>3</sub>) (SOLOMONS e FRYHLE, 2001).

#### Alquilação de Friedel-Crafts

Introdução de uma cadeia (R) proveniente de uma espécie capaz de formar um carbocátion, como por exemplo um haleto de alquila (R-X, exceto haletos primários, que não formam carbocátion). O ácido de Lewis será responsável por transformar a cadeia utilizada em um eletrófilo, porém, qualquer outra combinação de reagentes que resulte em um carbocátion poderá ser utilizada, como um alceno e um ácido (SOLOMONS e FRYHLE, 2001).

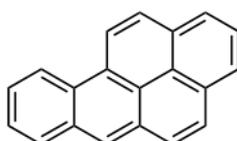
#### Acilação de Friedel-Crafts

Introdução de um grupo de acila ao composto aromático (como mostrado na imagem 7) a partir da formação do íon acílio que atuará como eletrófilo (SOLOMONS e FRYHLE, 2001).

### **Hidrocarbonetos aromáticos policíclicos**

Os Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos (HAPs) constituem uma família de compostos caracterizada por possuírem 2 ou mais anéis aromáticos condensados. Estas substâncias, bem como os seus derivados nitrados e oxigenados, têm ampla distribuição e são encontrados como constituintes de misturas complexas em todos os compartimentos ambientais.

#### **Tipos de HAP**



**Benzo[a]pireno**

Existem muitos HAPs, mas o mais estudado é o benzo[a]pireno (BaP). Tanto estes, como os seus derivados são formados pela combustão incompleta de material orgânico.

De maneira geral, tanto os HAPs como os seus derivados estão associados ao aumento da incidência de diversos tipos de cancro em animais, mas ainda não é claro se causam cancro no homem.

São poluentes orgânicos de grande persistência ambiental, e muitos deles são capazes de reagir, após transformações metabólicas (bioactivação prévia das enzimas do citocromo P450), com o ADN, tornando-se carcinogénicos e potenciais mutagénicos.

As propriedades físico-químicas dos HAPs são, em grande parte, determinadas por seus sistemas de duplas conjugadas, que variam com o número de anéis e portanto, com suas massas moleculares.

A complexidade e composição de misturas de HAPs depende das suas fontes emissoras. Em geral essas misturas são muito complexas, contendo uma grande variedade de HAPs em diferentes níveis de concentração.

Devido ao seu carácter ubiqüitário, constituem uma ameaça potencialmente fatal para a saúde de toda a população.

Os HAPs são uma família extensa, os mais estudados e com maior risco para a saúde são:

### Benzo[a]antraceno

O benzo(a)antraceno é um contaminante derivado da combustão incompleta do material orgânico. Esse composto é hidrocarboneto poliaromático (HPA) que apresenta quatro anéis aromáticos.

## **Propriedades Físico-químicas**

As propriedades físicas e químicas do benzo(a) antraceno, assim como de todos os HPAs são bastante influenciadas pelo sistema de duplas ligações conjugadas presentes nas estruturas desta classe de compostos e são fundamentais para descrever a dinâmica e as reações desse composto no meio ambiente.

CAS	56-55-3
Fórmula Molecular	C18H12
Massa Molecular	228,30
Ponto de Fusão (°C)	84,0
Ponto de Ebulição (°C)	437,6
Solubilidade (mg/L)	0,0094
Log Kow	5,76
Log Koc	5,36
Constante da Lei de Henry (atm·m <sup>3</sup> /mole) (25 °C)	1.2E-005
Pressão de Vapor (mm Hg) (25 °C)	2.1E-007
Atmospheric OH Rate Constant (cm <sup>3</sup> /molécula-s)	5E-011

A partir das propriedades deste composto é possível determinar que o benzo(a)antraceno apresenta altas temperaturas de fusão e de ebulição, é sólido à temperatura ambiente e apresenta baixas pressão de vapor e constante de Henry, o que faz com que tal composto tenda a se distribuir entre as fases do ar. Este composto é pouco solúvel em água, porém, é solúvel em solventes orgânicos e é altamente lipofílico. Por isso, tende a se acumular em tecidos lipídicos de plantas e animais; com relação às plantas, este composto concentra-se mais na superfície (peles e folhas) do que nos tecidos internos.

O coeficiente de partição octanol-água (Kow) é relativamente elevado, o que permite que composto em estudo apresente elevada afinidade por fases orgânicas e lipofílicas, bem como um importante potencial de adsorção sobre as matérias particuladas em suspensão no ar e a água, bem como um forte potencial de bioacumulação nos organismos. O benzo(a) antraceno é quimicamente inerte, porém, quando reage, participa de reações de substituição eletrofílica e de adição.

Riscos

A contaminação de rios, mares e florestas e, também da atmosfera por benzo(a)antraceno pode causar diversos danos irreparáveis à natureza e à saúde humana. Esse composto pode agir sobre os organismos diretamente ou através de seus derivados, principalmente.

A exposição biótica ao benzo(a)antraceno pode ocorrer pela inalação, pela pele ou pela ingestão de alimentos ou de água contaminada. Para os seres humanos podem ser acrescentadas outras vias de exposição tais como: hábito de fumar, inalação (passiva) de fumaça de cigarros e a exposição ocupacional em atividades ou processos que envolvam a produção ou manuseio de matérias-primas que sejam compostos por essa substância.

O benzo(a)antraceno é um composto mutagênico para uma ampla variedade de organismos, que incluem invertebrados, peixes, anfíbios, aves, mamíferos e o ser humano podendo causar modificações da proliferação de tecidos, como da medula óssea, dos órgãos linfáticos, das gônadas e do epitélio intestinal. Esse composto também cancerígeno, principalmente quando o organismo é exposto a ele pela via respiratória e/ou dérmica, podendo provocar tumoração em animais e mutação em bactérias.

É válido ressaltar que o caráter lipofílico do benzo(a)antraceno permite que ele entre com bastante facilidade nas membranas celulares, permitindo que se acumule em diversos tecidos. Ele é metabolizado em compostos mais hidrossolúveis o que facilita a sua eliminação através da excreção pelo sistema digestório e pelos rins.

Parte da alta toxicidade desse composto é justificada pela sua capacidade de bioacumulação em diversas de espécies de organismos. Além da bioconcentração direta da água, pode haver absorção a partir dos alimentos.

As plantas também podem absorver benzo(a)antraceno. A principal via de exposição é a atmosfera, acompanhada em segundo lugar pelo solo. Assim, as plantas de folhas largas contêm geralmente mais benzo(a)antraceno do que as de folhas estreitas; e a superfície externa das plantas contêm mais desse composto do que as estruturas internas. Após a absorção, há pouca transferência ou deslocamento desse HPA ao interior do vegetal.

#### Fontes

O benzo(a) antraceno é emitido tanto por fontes naturais como antropogênicas. A contribuição das fontes naturais é muito limitada restringindo-se, praticamente, à queima espontânea de florestas e emissões vulcânicas, na diagênese, na biosíntese de bactérias, algas e vegetais superiores, além de serem integrantes naturais do petróleo e no carvão. Entretanto, as fontes naturais correspondem a apenas 10 % das emissões totais. As atividades antrópicas são as principais fontes de benzo(a) antraceno no ambiente.

Antropogenicamente, o benzo(a)antraceno é formado principalmente pela de queima incompleta de combustíveis como petróleo e seus derivados, carvão, madeira, gás de carvão, e materiais. É válido ressaltar que a fumaça de cigarro, queimadas e calefação, em países de clima temperado, constituem outras fontes antrópicas desse composto. Fontes tecnológicas móveis ou estacionárias também podem gerar benzo(a)antraceno.

Entre as fontes móveis, está o motor de combustão interna enquanto que as fontes estacionárias são representadas pela atividade de geração de energia elétrica e de calor, bem como as atividades industriais e de incineração.

As fontes veiculares de emissão têm uma grande importância devido à complexidade e quantidade crescente de benzo(a)antraceno que é lançado no ar. Na água e no solo, as fontes desse hidrocarboneto poliaromático são a dispersão de matérias betuminosas, os derrames de hidrocarbonetos acidentais, as precipitações atmosféricas, as atividades industriais, os esgotos cloacais e os depósitos de lixo urbano.

### **Destinos e Transporte do Poluente no Ambiente**

O Benzo(a) antraceno pode sofrer reações como evaporação, oxidação, dispersão, sedimentação, dissolução e biodegradação. Entretanto, devido às características que este composto possui, as reações mais importantes são a oxidação, dispersão, biodegradação e sedimentação. Isso porque o benzo(a)antraceno não tende a evaporar muito, pois é pouco volátil devido à baixa pressão de vapor ( $2,1 \times 10^{-7}$  mmHg) e à baixa Constante de Henry ( $1,2 \times 10^{-5}$  atm-m<sup>3</sup>/mol), permanecendo mais tempo na coluna d'água e também não tende a sofrer dissolução, por tratar-se de um composto pouco solúvel (solubilidade = 0,0094 mg/L). Porém, quando em água, sofre oxidação devido à ação do O<sub>3</sub>, dos sais e dos raios solares. Na atmosfera sofre principalmente fotólise e fotooxidação. Por ser um composto hidrofóbico e com alto Kow (Log Kow: 5,76), se agrega mais facilmente a partículas em suspensão que posteriormente decantam, carregando o composto e facilitando assim, sua dispersão pela movimentação da água. Além dessas reações o composto pode sofrer biodegradação em água e nos sedimentos.

Após um derrame no solo de benzo(a)antraceno é provável que grande parte do volume fique retido nas camadas superficiais do solo, pois é fortemente adsorvido pela matéria-orgânica (alto Kow). Em água, também será adsorvido em sedimentos e partículas na coluna de água, incluindo fitoplâncton e zooplâncton, o que também está relacionado ao alto valor de Kow.

Este composto tende a ir muito pouco para a atmosfera, devido à baixa pressão de vapor e também à baixa constante de Henry. O volume deste composto que vai para a atmosfera é encontrado tanto como vapor livre quanto adsorvido em partículas, que serão transportadas e estarão sujeitas ao assentamento gravitacional e à limpeza pela chuva e pela neve.

O benzo(a)antraceno é um composto químico apolar, o que limita a sua reação e solubilidade na água, favorecendo a sua adesão à partículas sólidas, como sedimentos, porém, diferentes reações podem ocorrer, como a oxidação, onde ocorre a combinação dos hidrocarbonetos com o oxigênio, formando compostos hidrossolúveis. Quando a oxidação antecede a hidrólise, pode ocorrer a formação de diolepóxidos.

Os sais presentes em água, bem como a incidência de raios solares aceleram esse processo. Pode ocorrer também a sedimentação, por se tratar de um composto hidrofóbico, se agrega mais facilmente a partículas em suspensão que depois se decantam ou carregam o composto. Quando há presença de fungos e bactérias o composto pode sofrer biodegradação pelo próprio metabolismo destes organismos.

A fonte predominante dos HAPs é a combustão incompleta da matéria orgânica.

Os HAPs são emitidos por fontes naturais e antropogénicas (resultantes da actividade humana). A contribuição das fontes naturais é muito limitada restringindo-se, praticamente, à queima espontânea de florestas e emissões vulcânicas. As fontes antropológicas representam o principal processo de produção de HAPs e dizem respeito a:

pirólise de madeira para produção de carvão;

operações de transporte e refinação do petróleo;

incineração de resíduos domésticos e industriais;

queimas de matéria orgânica de campos e florestas;

geração de energia via queima de combustíveis fósseis;

pirólise de querosene para a formação de benzeno, tolueno e outros solventes orgânicos;

emissão de motores de veículos (particularmente a diesel);

fumo do tabaco;

cozinhados;

incêndios.

## Vias de Exposição

### Ar

A inalação de partículas presente no ar com HAPs é uma importante via de exposição a estes compostos.

O fumo do tabaco é a principal fonte de contaminação do ar com HAPs carcinogénicos. Um indivíduo que fume 1 maço de tabaco sem filtro por dia, vai estar exposto ao dobro de HAPs carcinogénicos em relação a quem usa filtro.

### Alimentos

Excluindo as vias de exposição ocupacional, a dieta é, normalmente, a principal fonte de exposição em pessoas que não estão expostas diariamente ao fumo do tabaco, ou seja, os não fumadores.

HAPs já foram detectados em alimentos brutos e processados. O grau de contaminação depende do modo como os alimentos são processados, preservados e armazenados.

HAPs são principalmente detectados quando o músculo (incluindo bife, porco, peixe ou frango) é cozinhado em altas temperaturas, como em frigideiras ou em contato direto com o fogo, como em churrasqueiras.

A presença de HAPs em alimentos brutos de origem vegetal, pode ser atribuída principalmente à deposição atmosférica. Animais aquáticos, como mexilhões e ostras que tendem a acumular HAPs podem, eventualmente, representar outra forma de aporte destes compostos aos seres humanos e a outros animais. Em alimentos processados, a presença de HAPs está associada ao alimento ou ainda a alguma etapa de processamento, como é o caso da defumação, fritura ou assadura dos alimentos.

### Água

De acordo com a Agência Internacional para Pesquisas do Cancro (IARC) os HAPs com poder carcinogénico que podem aparecer na água são os benzofluorantenos, benzo[a]pireno, benzo[a]antraceno, dibenzo[a,h]antraceno e indeno[1,2,3-cd]pireno. Destes, o benzo[a]pireno (BaP), é considerado o mais cancerígeno. Segundo a U.S. Environmental Protection Agency (U.S. EPA), o BaP em quantidades superiores a 0,2 ppb na água potável causa problemas à saúde. A exposição prolongada a concentrações superiores a 2 ppb causa um efeito potencial no desenvolvimento de cancro. Na maioria das águas e

sedimentos, o BaP resiste ao ataque por microorganismos ou substâncias químicas reactivas, podendo, contudo, evaporar ou ser degradado por exposição à luz solar. O BaP bioconcentra-se em organismos aquáticos que não o metaboliza, incluindo o plâncton, as ostras e alguns peixes (IARC) Devido à baixa solubilidade e elevada afinidade para a matéria particular, os HAPs não são, normalmente, encontrados na água em elevadas concentrações. A maior fonte de contaminação dos HAPs em água potável é devido ao coaltar que é usado para proteger os canos da água potável da corrosão. Esta situação faz com que os valores de HAPs na nossa água aumentem, e deste modo vemos também os valores aumentados na nossa comida, devido à água que usamos para a confeccionar, assim como o uso de utensílios contaminados com coaltar ou até a própria comida pode estar contaminada.

## Solo

HAPs cancerígenos são também encontrados à superfície dos solos. Estes compostos são absorvidos para as folhas das plantas e depois são transferidos para o solo das florestas. Tanto em florestas como solos rurais, os valores encontrados são idênticos, mas nas áreas metropolitanas estes valores já são muito mais elevados, devido à queima de combustíveis fósseis. Os valores em áreas industriais são mais elevados.

A maioria dos HAPs encontrados nas águas e solos são resultado da deposição atmosférica.

## **Toxicocinética**

### **Absorção**

Os HAPs são compostos altamente lipofílicos, por isso, são rapidamente absorvidos por todas as vias de exposição (inalação, exposição oral e dérmica).

A quantidade absorvida por inalação varia de acordo com o grau de contaminação atmosférica, que está directamente relacionado com a urbanização, o tráfego de veículos automóveis (principalmente veículos com motor a diesel) e com o tipo e a industrialização da área. Em ambientes fechados, o fumo de cigarro e as fontes de aquecimento podem contribuir para o aumento dos níveis ambientais de HAPs. Absorção de HAPs inalados ocorre principalmente através da parede interior dos brônquios e em menor

quantidade através dos alvéolos pulmonares. A absorção dérmica é bastante importante em algumas actividades industriais, podendo ser a responsável por até 90% da quantidade absorvida pelo organismo.

A absorção percutânea dá-se por difusão passiva e é rápida mas a extensão de absorção é variável entre os compostos e pode ser afectada pelo veículo usado para administração.

Os alimentos são considerados outra importante fonte de exposição humana, tanto devido à formação de HAPs durante o cozimento, quanto devido à deposição atmosférica sobre grãos, vegetais e frutas. Os HAPs quando ingeridos são captados por compostos lipofílicos. A absorção gastrointestinal é rápida e aumenta com a lipofilia ou na presença de óleos no tracto gastrointestinal. A solubilidade dos HAPs e a presença de bile também influencia a absorção.

Deste modo, a absorção de HAPs após inalação, exposição oral ou dérmica pode ser afectada pelo veículo de administração.

A absorção pulmonar do benzo[a]pireno pode ser influenciada por partículas transportadoras e pela solubilidade do veículo. A sua absorção por ingestão é baixa. Óleos aumentam a absorção de benzo[a]pireno e a água e comida sólida suprimem a absorção. Quando o benzo[a]pireno é adsorvido em partículas, o uptake respiratório é mais baixo desde que as partículas fiquem retidas no sistema respiratório por um longo período de tempo.

## Distribuição

Ao HAPs distribuem-se em quase todos os tecidos. Pico de concentração nos tecidos ocorre mais cedo com doses mais elevadas.

O tecido mamário e outros tecidos gordos são depósitos de armazenagem importantes mas devido ao rápido metabolismo não há acumulação significativa. O armazenamento ocorre principalmente nos rins, fígado e tecido adiposo, com pequenas quantidades no baço, glândulas adrenais e ovários.

O tracto gastrointestinal contém níveis relativamente elevados de metabolitos, independentemente da via de administração, como resultado da excreção hepatobiliar.

Distribuem-se amplamente nos tecidos maternos e são detectados no feto demonstrando que eles atravessam a placenta. No entanto, a transferência placentária é limitada e, deste modo, os níveis fetais não são tão elevados como na mãe. Estão presentes no cordão umbilical e leite materno.

Níveis detectáveis de benzo[a]pireno podem ser observados na maioria dos órgãos internos desde minutos a horas após a exposição. Níveis mais elevados são encontrados no fígado.

## Metabolização

Os HAP tornam-se capazes de danificar o ADN após serem metabolizados por enzimas específicas no corpo.

A lipofília dos HAPs torna-os capazes de penetrar as membranas celulares e de permanecerem indefinidamente no organismo. No entanto, o metabolismo dos HAPs torna-os mais hidrosolúveis e assim mais rapidamente excretáveis. O metabolismo dos HAPs é complexo. HAPs são convertidos em todos os tecidos do corpo que contém gordura e envolve várias vias possíveis. Os produtos do metabolismo incluem epóxidos intermediários, dihidrodiois, fenóis, quinonas. Estes podem ser conjugados com glucoronídeos e ésteres de sulfato; as quinonas também formam conjugados com a glutatona.

O metabolismo existe para os tornar mais excretáveis, no entanto, podem ser convertidos a metabolitos mais tóxicos ou carcinogénicos. Um factor que pode influenciar o delicado balanço entre toxificação e destoxificação é o local onde os metabolitos são formados visto que a afinidade e a atividade das enzimas varia.

Estes compostos movem-se rapidamente nas células. Quando dentro das células, estas usam a sua maquinaria de destoxificação para tentar remover o HAPs. O citocromo P450 adiciona oxigénio ao anel, tornando-o mais solúvel em água e criando âncoras para a ligação de grupos volumosos como açúcares ou glutatona. Normalmente, estas moléculas modificadas são excretadas de forma segura do organismo. No entanto, algumas das formas intermediárias são altamente perigosas e causam dano genético antes de conseguirem ser removidas. Um bom exemplo é o benzo[a]pireno. Não é ele próprio que ataca o ADN mas sim um produto do seu metabolismo – um intermediário com um anel epóxido reactivo. Esta molécula poderá ser um mutagénio. O anel planar é semelhante a uma base de ADN permitindo à molécula deslizar confortavelmente entre as bases do ADN e por fim atacar a adenina ou guanina vizinha formando uma ligação covalente.

As vias pelas quais o benzo[a]pireno pode ser bioactivado pelas seguintes vias:

- Via da formação dos diol-epóxidos
- Via do radical catião
- Via da formação de orto-quinonas

A activação metabólica de HAPs lipofílicos ocorre primariamente no fígado e também em muitos outros tecidos incluindo as barreiras epiteliais. No entanto, a distribuição pelo sistema circulatório é generalizada, absorção lenta em muitos epitélios resulta em níveis elevados de enzimas que activam HAPs no local de entrada. Esta distribuição desigual de doses é um factor que pode contribuir para a elevada propensão dos HAPs actuarem como carcinogénios nos locais por onde entram no organismo. Apesar dos HAPs serem semelhantes eles têm diferenças estruturais que são a base das diferenças no metabolismo e na carcinogenicidade.

## Excreção

Quando absorvidos directamente da fase gasosa, os HAPs são rapidamente metabolizados e eliminados pelo organismo (o Benzo[a]pireno, por exemplo, é eliminado em cerca de 1 hora). HAPs não têm tempo de semi-vida longo. Entretanto, quando estão associados a partículas respiráveis, esta eliminação é bem mais demorada podendo levar semanas. Por serem rapidamente metabolizados nos tecidos corpóreos, a bio-acumulação não é observada, mesmo nos tecidos ricos em gorduras.

As maiores rotas de eliminação destas substâncias após metabolismo hepático (metabolitos dos HAPs e seus conjugados) são as predominantemente as fezes e em níveis muito baixos, a urina.

Após ingestão de dietas contendo benzo[a]pireno, em níveis muito baixos, o metabolito 1-hidroxipireno é detectado na urina.

Conjugados excretados na bile podem ser hidrolisados por enzimas presentes na flora intestinal e reabsorvidos. Pode ser inferido de dados disponíveis que os HAPs não persistem no organismo por um longo período de tempo e o seu turnover é normalmente rápido. Isto exclui os grupos funcionais dos HAPs que se tornam covalentemente ligados a constituintes de tecidos, em particular a ácidos nucleicos, e que não são removidos por reparação.

Depois da excreção hepatobiliar a eliminação nas fezes é a maior via de remoção do benzo[a]pireno do organismo, independentemente da via de administração. A urina é outra via de excreção, mas tem menor importância que a bile.

## Efeitos dos HAPs

Respiratório: Irritação, tosse crônica, bronquite e cancro broncogênico pode ocorrer com exposição crônica.

Gastrointestinal: Leucopenia e cancro dos lábios e da cavidade oral podem-se desenvolver com exposição crônica

Hepático: Hepatotoxicidade suave tem sido demonstrada em animais de laboratório. Alguns indicam que hepato e nefrotoxicidade podem ocorrer a doses elevadas.

Genitourinário: Hematúria, cancro de bexiga e rim devido a exposição crônica. Nefrotoxicidade suave em ratos.

Hematológico: Agranulocitose, anemia, leucopenia e pancitopenia desenvolvida em ratos com exposição aguda.

Dermatológico: Verrugas do coaltar - lesões pré-cancerígenas (por exposição a luz UV), eritema, queimaduras, fotosensibilidade, lesões acneiformes, fotossensibilização e cancro podem-se desenvolver com exposição crônica. Visto que os HAPs são ubiqüitários no ambiente, a exposição simultânea a HAPs e a luz ultravioleta é inevitável. A fotomutagenicidade e fotocarcinogenicidade destes compostos têm uma importância considerável para a saúde humana. Pele contaminada com HAPs está muito exposta à luz especialmente em pessoas que trabalham na rua. Alguns produtos de medicina contêm HAPs. Por exemplo, o coaltar, uma complexa mistura de HAPs, é muito usado em cremes, loções e xampus para o tratamento da psoríase. Uma aplicação tópica de coaltar na pele seguida de radiação UV aumenta o risco de desenvolver cancro da pele.

Imunológico: Desenvolvimento de neoplasmas. Alguns HAPs são imunotóxicos e alguns suprimem componentes seletivos do sistema imune. O espectro da imunotoxicidade sugere que os HAPs interferem com a maquinaria de apoptose/necrose dos linfócitos, por exemplo, induzindo à apoptose de células pré-B. Dois mecanismos principais têm sido sugeridos como promotores da imunossupressão induzida por HAPs. Um envolve a reatividade dos HAPs com o receptor Ah e o outro a sua capacidade para aumentar a concentração de cálcio intracelular em células do sistema imune.

Em ambos casos as vias de sinalização antigênicas e mitogênicas do receptor são alteradas levando a proliferação e/ou morte (apoptose) das células do sistema imune. HAPs exercem muitos efeitos importantes no sistema imune. A dose e a via de exposição determinam a natureza do efeito na resposta imune específica e adaptativa. Estudos com HAPs têm indicado que o AhR tem um papel importante na ativação dos mecanismos imunotóxicos dos HAPs via diol-epóxido que levam a interações no ADN, causa genotoxicidade e suprime a imunidade concedida por vias dependentes do p53.

O diol epóxido do benzo[a]pireno também pode afetar locais alvo de proteínas e modular vias de sinalização dos linfócitos por mecanismos não genotóxicos.

Certos metabolitos dos HAPs, como as quinonas do benzo[a]pireno, podem ser formados via citocromo P450 e vias independentes, e os ciclos redox das quinonas pode originar stress oxidativo em células linfóides. HAPs imunossupressores rompem a homeostase do Ca<sup>2+</sup> levando a inibição das vias dependentes de Ca<sup>2+</sup> da activação das células B e T. A elevação de Ca<sup>2+</sup> produzida pelos HAPs imunossupressores pode resultar da inibição da Ca<sup>2+</sup>-ATPase no retículo endoplasmático (SERCA).

Reprodutivo: Alguns estudos indicam que os HAPs podem afetar o desenvolvimento fetal e alterar a performance reprodutiva do homem e da mulher. Têm sido encontrados adutos HAPs-DNA na placenta e em tecidos fetais indicando que os HAPs são transferidos e ativados pelo feto. Adutos na placenta e no feto têm sido encontrados tanto em fumantes como em não fumantes sendo os níveis relativamente superiores em fumantes. Eles também são maiores em mulheres que vivem em locais com maior poluição do ar. A ocorrência e extensão da toxicidade desenvolvida é dependente em parte do genótipo maternal e fetal.

Cardiovasculares: Tem surgido a hipótese que os HAPs do fumo do cigarro ou os produtos de combustão podem causar lesões no endotélio e alterações no crescimento celular das células musculares, levando a expansão destes nas paredes das artérias e assim podem contribuir para o desenvolvimento de aterosclerose. É correto dizer que o fumo do tabaco é o maior risco para doenças cardiovasculares e há alguma evidência que a exposição ocupacional a produtos de combustão contendo HAPs podem ser associada a um aumento no risco para desenvolver doenças cardiovasculares. Adutos no ADN têm sido detectados no endotélio da artéria mamária interna de fumantes e nas células do músculo liso da aorta afetados por lesões arterioscleróticas. Indivíduos com o genótipo GSTM1\*2/2 têm níveis de adutos mais elevados tanto em fumantes como em não fumantes.

Os HAPs podem também interagir com receptores citosólicos alterando a expressão de determinados genes. No entanto, não tem sido estabelecida nenhuma relação causal entre risco cardiovascular e exposição aos HAPs provenientes do tabaco ou a produtos de combustão em exposição ocupacional.

### Carcinogenicidade

Câncer é o efeito tóxico dos HAPs mais significativo em animais, mas ainda existem dúvidas sobre seu efeito em humanos. Muitos dos HAPs só se tornam tóxicos após metabolismo. Exposição crônica aumenta a probabilidade de iniciação de cancro. Aumento da incidência de cancros na pele e na bexiga, pulmões e trato gastrintestinal em trabalhadores expostos. Em geral, HAPs são

convertidos a óxidos e dihidrodióis, que são oxidados a diol epóxidos. Tanto os óxidos como os diol epóxidos são metabólitos que reagem com o ADN. Óxidos dos HAPs podem formar adutos estáveis com o ADN e os diol epóxidos podem formar adutos estáveis e depurinadores com o ADN através de carbânions eletrofílicos. A reatividade dos óxidos e dos diol epóxidos é dependente da topologia (ex região bay, região fjord, tipos de anel), e a reatividade dos diol epóxidos é dependente de fatores tais como estereoquímica e grau de planaridade. Tanto os adutos estáveis como os depurinativos são formados primeiro com adeninas e guaninas e induzem mutações que estão fortemente associadas com o processo tumorigênico.

Os HAPs têm de ser ativados metabolicamente para induzir tumores. No entanto, há uma grande variabilidade individual na capacidade de metabolização dos HAPs: pessoas deficientes em enzimas que activam HAPs a metabólitos reativos deverão ter menos risco de desenvolver câncer, pessoas com deficiência em enzimas que destoxificam metabólitos reativos poderão ter este risco aumentado. Muitos fatores incluindo raça, idade, sexo, tabaco, álcool, fatores genéticos podem induzir ou inibir o metabolismo o que indica que existem interações complexas.

### Processo Inflamatório

Alguns HAPs podem, após metabolismo, induzir processos inflamatórios. Outro efeito dos HAPs é a sua atividade inibitória na comunicação intercelular gap junctional.

### Importância do AhR

Alguns dos efeitos biológicos dos HAPs, tais como indução enzimática de enzimas metabolizadoras de xenobióticos, imunossupressão, teratogenicidade e carcinogenicidade pensa-se que sejam mediados pela activação do aryl hydrocarbon receptor (AhR) e posterior perturbação da homeostase celular.

Este receptor está amplamente distribuído e tem sido detectado na maioria das células e tecidos. O AhR é um regulador da transcrição (dependente de ligando) de muitos genes incluindo genes codificadores de enzimas envolvidas no metabolismo de xenobióticos tal como de genes codificadores factores envolvidos no crescimento celular e diferenciação.

O AhR está localizado no citoplasma e depois de se ligar ao ligando (ex. HAP) o complexo AhR-ligando entra no núcleo onde se liga a sequências específicas do ADN flanqueando os genes regulados pelo AhR.

Há também evidência que o AhR actua por entre uma variedade de vias e mais recentemente, que ocorre cross-talk com outros receptores nucleares capazes de controlo tecido-específica e tipo de célula- específica de expressão de genes. A translocação do AhR activado para o núcleo deve requerer concentrações limiar do ligando. Vários metabolitos oxidativos e electrofilicos dos HAPs também são conhecidos por induzirem sistemas enzimáticos via elementos receptores antioxidantes.

Efeitos biológicos da sinalização do AhR e elemento receptor antioxidante envolve uma variedade de respostas celulares, incluindo regulação das fases I e II do metabolismo, peroxidação lipídica, produção de metabolitos reactivos do ácido araquidônico, diminuição dos níveis séricos de tiroxina e vitamina A e activação persistente do receptor da hormona tiróide. Sinalização AhR poderá resultar em respostas tóxicas e adaptativas ou perturbação das vias endógenas. Além disso, a activação metabólica dos HAPs produz stress celular.

Por sua vez isto activa as vias MAPK (mitogen-mediated protein kinase), nomeadamente as Nrf2. As proteínas Nrf2 dimerizam com as oncoproteínas Maf tornando-se capazes de ligar a um elemento de resposta antioxidante/electrofilico, que tem sido identificado em muitas enzimas de fase I e II entre outras enzimas de defesa e controla a sua expressão. Por esta razão, o stress celular pode ser regulado independentemente das enzimas metabolizadoras de xenobióticos mediadas por AhR.

## Tratamento

A exposição aguda a dose elevadas pode originar intoxicação. Nesses casos os sintomas apresentados podem ser taquipneia, cianose, dispneia, depressão do SNC, taquicardia ou febre. Nestes casos deve-se monitorizar os gases arteriais, fazer um raio-X e ECG. O uso de simpaticomiméticos pode ser ponderado no caso de arritmias.

Não existe antídoto específico mas podem ser tomadas uma série de medidas capazes de melhorar o estado da pessoa:

A primeira medida é retirar o doente do contacto com a fonte dos HAPs.

Em caso de exposição oral não se deve induzir a emese e a utilização de carvão ativado de ser considerada.

Nos casos de inalação é recomendado fornecer oxigênio humidificado.

Na exposição ocular os olhos devem ser lavados com solução hidrossalina pelo menos 15 minutos.

Na exposição dérmica deve-se remover a roupa contaminada e lavar a área afectada.

## HAPs no Espaço

O espaço não é um vácuo total e apesar de o espaço interestelar ser mais desprovido de matéria do que qualquer vácuo criado artificialmente na terra, existe matéria no espaço.

A maior parte da matéria são gases como o hidrogénio e o Hélio, mas outras moléculas tem sido identificadas no espaço. A irradiação ultravioleta, os raios cósmicos e alguns processos térmicos como a formação de estrelas ou colisões podem originar a formação de moléculas orgânicas complexas como os HAPs. Estes HAPs, tal como a restante matéria interestelar, podem ser incorporados em meteoritos, cometas e poeiras cósmicas. Os HAPs são detectados através do espaço devido à capacidade absorverem fotões e re-emitirem em energias mais baixas (fluorescência) sendo depois detectados em comprimentos de onda que correspondem ao espectro do infravermelho

Acompanhe como ocorre a formação dos nomes de hidrocarbonetos:

Et (2 carbonos) + An (Apenas ligações simples) + O = Etano

Observe os demais exemplos:

Propano

Eteno

Etino

Propadieno

Em alguns casos é preciso indicar a posição da ligação dupla ou tripla. A numeração deve iniciar a partir da extremidade mais próxima dessa ligação.

1,3-butadieno

1-butino

## Hidrocarbonetos alifáticos

Formados por cadeias carbônicas abertas ou acíclicas, as quais possuem carbonos terminais.

#### Hidrocarbonetos cíclicos

Formados por cadeia carbônica fechada ou cíclica as quais não possuem carbonos terminais.

Exemplos de hidrocarbonetos cíclicos: ciclano, cicleno, ciclino e aromáticos (anel benzênico).

#### Hidrocarbonetos saturados

Formados por ligações simples, por exemplo, os alcanos e os ciclanos.

#### Hidrocarbonetos insaturados

Formados por ligações duplas ou triplas, por exemplo, os alcenos, os alcinos, os alcadienos.

#### Alcanos

Também chamados de parafinas ou parafínicos

São hidrocarbonetos alifáticos saturados

Eles apresentam cadeia aberta (acíclica) formada por ligações simples

Possuem a fórmula geral representada pela expressão  $C_nH_{2n+2}$

Exemplo: o propano ( $H_3C-CH_2$ ), de fórmula molecular:  $C_3H_8$

#### Alcenos

Também chamados de olefinas, alquenos ou hidrocarbonetos etilênicos

Compostos alifáticos insaturados

Formados por cadeias carbônicas abertas (acíclica) que apresentam uma dupla ligação

A fórmula geral dos alcenos é representada pela expressão  $C_nH_{2n}$

Exemplo: o eteno ( $CH_2=CH_2$ ) de fórmula molecular:  $C_2H_4$

## Alcinos

Também de metilacetileno

São hidrocarbonetos alifáticos insaturados

São formados por cadeias carbônicas fechadas (acíclicas) constituídas de ligações triplas

A fórmula geral desses compostos é  $C_nH_{2n-2}$

Exemplo: o propino ( $CHC-CH_3$ ) de fórmula molecular:  $C_3H_4$

## Alcadienos

Também chamados de dienos ou diolefinas

São hidrocarbonetos alifáticos insaturados

São formados por cadeia abertas (acíclicas) constituídos de duas ligações duplas

A fórmula geral dos alcadienos é representada pela expressão  $C_nH_{2n-2}$

Exemplo: o propadieno ( $H_2C=C=CH_2$ ), de fórmula molecular:  $C_3H_4$

## Ciclanos

Também chamados de cicloalcanos, cicloparafinas ou hidrocarbonetos naftênicos

São compostos saturados formados por ligações simples

Apresentam cadeia carbônica fechada (cíclica)

A fórmula geral dos ciclanos é representada pela expressão  $C_nH_{2n}$

Exemplo: ciclobutano ( $CH_2-CH_2-CH_2-CH_2$ ) de fórmula molecular:  $C_4H_8$

## Ciclenos

Também chamados de cicloalcenos;

São hidrocarbonetos insaturados, formados por ligação dupla

Apresentam cadeia carbônica fechada (cíclica)

A fórmula geral dos ciclenos é representada pela expressão  $C_nH_{2n-2}$

Exemplo: o ciclobuteno ( $H_2C-CH=CH-CH_2$ ) de fórmula molecular:  $C_4H_6$

### Ciclinos

Também chamados de cicloalcinos ou cicloalquinos

São hidrocarbonetos cíclicos e insaturados

Formados por cadeias carbônicas fechadas, as quais possuem uma ou mais ligações triplas

A fórmula geral é representada pela expressão:  $C_nH_{2n-4}$

Exemplo: o ciclopentino ( $CH_2-CH_2-C=C-CH_2$ ) de fórmula molecular:  $C_5H_6$

### Aromáticos

Também chamados de arenos

São compostos insaturados, pois apresentam 3 ligações duplas

Possuem cadeia carbônica fechada ou cíclicas

Constituídos de no mínimo um anel aromático

Exemplo: o anel de benzeno ( $CH=CH-CH=CH-CH=HC$ ) de fórmula molecular:  $C_6H_6$

### Alcanos

Também denominados hidrocarbonetos parafínicos ou parafinas, apresentam cadeia aberta e saturada.

Nomenclatura: prefixo + indicativo de ligação + O (terminação de hidrocarbonetos).

Prefixos: observe abaixo a tabela de prefixos que servirá para determinar a nomenclatura de todos os compostos orgânicos.

Nº de carbonos	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Prefixo	MET	ET	PROP	BUT	PENT	HEX	HEPT	OCT	NON	DEC

Fórmula Geral:  $C_nH_{2n + 2}$

Hidrocarbonetos são compostos formados exclusivamente por carbono e hidrogênio (C e H). Daí o nome: hidro (de hidrogênio) e carboneto (de carbono). Estão presentes no dia a dia, na economia e na indústria, como, por exemplo, inclui o gás natural, o petróleo e seus derivados.

Alcanos (ou hidrocarbonetos parafínicos): Hidrocarbonetos de cadeia saturada, ou seja, possuem apenas ligações simples entre carbonos e são cadeias acíclicas (cadeias abertas). Fórmula Geral:  $C_nH_{2n+2}$ . Na nomenclatura, possuem o intermediário "an".

Alcenos (Alquenos ou Olefinas): Hidrocarbonetos de cadeia insaturada com pelo menos uma ligação dupla, acíclicas (cadeias abertas). Fórmula Geral:  $C_nH_{2n}$ . Na nomenclatura, possuem o intermediário "en".

Alcinos (ou Alquinos): Hidrocarbonetos acíclicos, com pelo menos uma ligação tripla. Fórmula Geral:  $C_nH_{2n-2}$ . Na nomenclatura, possuem o intermediário "in".

Alcadienos (ou Dienos): Hidrocarbonetos de cadeias abertas com duas ligações duplas. Em sua nomenclatura possuem o intermediário -dien-. Fórmula geral:  $C_nH_{2n-2}$ .

Ciclanos (Cicloalcanos ou cicloparafinas): Hidrocarbonetos com apenas uma ligação dupla, de cadeia fechada, cíclicos. Sua nomenclatura difere da dos alcenos apenas por ser precedida pela palavra ciclo. Fórmula geral:  $C_nH_{2n}$ .

Ciclenos (Cicloalcenos ou cicloalquenos): Hidrocarbonetos saturados (somente com ligações simples) de cadeia fechada, cíclicos. Sua nomenclatura difere da dos alcanos apenas por ser precedida pela palavra ciclo.

Ciclinos (Cicloalcinos ou cicloalquinos): Hidrocarbonetos com uma ligação tripla, de cadeia fechada. Sua nomenclatura difere da dos alcinos apenas por ser precedida pela palavra ciclo.

Aromáticos: Possuem um ou mais anéis benzênicos (aromáticos), que são representados conforme a figura abaixo. Eles não possuem uma fórmula geral, e sua nomenclatura segue uma regra particular diferente da dos outros grupos de hidrocarbonetos, pois depende da quantidade de anéis e se apresenta ramificações.

Existem milhares de hidrocarbonetos. Alguns exemplos bem conhecidos são:

o metano, ou gás natural, usado em veículos;

o propano e o butano, usados em gás de cozinha;

o octano, ou gasolina; o etanol, ou álcool etílico, presente em bebidas e perfumes, entre outros produtos;

a propanona, ou acetona.

## Classificação dos hidrocarbonetos

### Alifáticos

Os hidrocarbonetos alifáticos são aqueles em que a cadeia de carbonos é aberta, ou acíclica.

### Cíclicos

Os hidrocarbonetos cíclicos são aqueles em que a cadeia de carbonos tem uma formação cíclica. Isso quer dizer que não há “carbonos terminais”. Um hidrocarboneto pode ser cíclico e, ainda assim, ter um átomo de carbono fora do ciclo.

### Saturados

Os hidrocarbonetos saturados são aqueles em que as ligações entre os átomos são simples.

### Insaturados

Os hidrocarbonetos insaturados são aqueles em que há ligações duplas ou triplas entre os átomos.

### Homogênea

Os hidrocarbonetos de cadeia homogênea são aqueles em que não há nenhum átomo diferente de carbono ou hidrogênio.

Heterogênea

Os hidrocarbonetos de cadeia heterogênea são aqueles em que há átomos de outros elementos.

### **Tipos de Hidrocarbonetos**

Alcanos

Os hidrocarbonetos alifáticos e saturados são chamados de alcanos.

Alcenos

Os hidrocarbonetos alifáticos e insaturados, que apresentam uma ligação dupla entre seus átomos de carbono, são chamados de alcenos.

Alcinos

Os hidrocarbonetos alifáticos e insaturados, que apresentam uma ligação tripla entre seus átomos de carbono, são chamados de alcinos.

Alcadienos

Os hidrocarbonetos alifáticos e insaturados, que apresentam duas ligações duplas entre seus átomos de carbono, são chamados de alcinos.

Ciclanos

Os hidrocarbonetos cíclicos e saturados são chamados de ciclanos.

Ciclenos

Os hidrocarbonetos cíclicos e insaturados, que apresentam uma ligação dupla entre seus átomos de carbono, são chamados de ciclenos.

Ciclinos

Os hidrocarbonetos cíclicos e insaturados, que apresentam uma ligação tripla entre seus átomos de carbono, são chamados de ciclinos.

Aromáticos

Os hidrocarbonetos cíclicos que são compostos por, no mínimo, um anel de benzeno são chamados de aromáticos. O anel de benzeno é o nome dado à estrutura  $C_6H_6$  característica do benzeno.

Alguns compostos que não apresentam a estrutura do benzeno também são considerados aromáticos. Eles seguem a Regra de Hückel, segundo a qual o número de elétrons  $\pi$  ( $\pi$ ) é igual a  $4n + 2$ , onde  $n = 0, 1, 2, 3\dots$

### **Prefixo**

O prefixo da nomenclatura está relacionado ao número de carbonos encontrados na cadeia principal da molécula. Os prefixos são:

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

### **Infixo**

O infixo da nomenclatura está relacionado ao tipo de ligação encontrada na molécula de hidrocarboneto. Os infixos são:

Ligações simples apenas: AN

1 ligação dupla: EN

1 ligação tripla: IN

2 ligações duplas: DIEN

2 ligações triplas: DIIN

## Sufixo

O sufixo é responsável por indicar a função orgânica. No caso dos hidrocarbonetos, o sufixo é sempre “o”.

Hidrocarboneto é um composto químico constituído apenas por átomos de carbono e de hidrogênio.

Os hidrocarbonetos naturais são compostos químicos constituídos por átomos de carbono (C) e de hidrogênio (H), aos quais se podem juntar átomos de oxigênio (O), nitrogênio (N) e enxofre (S) dando origem aos compostos orgânicos, classificados de acordo com seus grupos funcionais. São conhecidos alguns milhares de hidrocarbonetos. As diferentes características físicas são uma consequência das diferentes composições moleculares. Contudo, todos os hidrocarbonetos apresentam uma propriedade comum: oxidam-se facilmente libertando calor.

Hidrocarbonetos líquidos geologicamente extraídos são chamados de petróleo (literalmente "óleo de pedra") ou óleo mineral, enquanto hidrocarbonetos geológicos gasosos são chamados de gás natural. Todos são importantes fontes de combustível. Hidrocarbonetos são de grande importância econômica porque constituem a maioria dos combustíveis fósseis (carvão, petróleo, gás natural, etc.); vários outros produtos como biocombustíveis, plásticos, ceras, solventes e óleos são compostos orgânicos cuja estrutura básica é formada por hidrocarbonetos (mas que não são hidrocarbonetos por possuírem outros átomos além do carbono e hidrogênio).

Os hidrocarbonetos são classificados de acordo com sua saturação, que posteriormente servirá para nomeá-lo. O primeiro passo é verificar a presença de ligações duplas e triplas. Se houver, é necessário numerar os átomos de carbono da cadeia principal.

De acordo com a quantidade de insaturações encontradas, o hidrocarboneto receberá uma respectiva classificação. É preciso, ainda, observar a presença de ciclos. A relação entre as ligações, com os respectivos grupos de hidrocarbonetos, está listada abaixo:

Triplas	Duplas	Acíclico	Cíclico
0	0	Alcano	Ciclano

1	0	Alcino	Ciclino*
2	0	Alcadiino	
3	0	Alcatriino*	
0	1	Alceno	Ciclino
0	2	Alcadieno	Ciclodieno*
0	3	Alcatrieno*	Ciclotrieno*

\*Compostos raros

Há duas formas de se obter um hidrocarboneto qualquer, pela fórmula estrutural - em que cada estrutura representa um hidrocarboneto -, e pela fórmula molecular (cada fórmula pode identificar diversos hidrocarbonetos).

Até as primeiras décadas do século XIX, muitos cientistas acreditavam que os compostos orgânicos eram obtidos a partir de organismos, como vegetais e animais.

Eles acreditavam nisso porque, desde a Antiguidade, as civilizações retiravam corantes de plantas para tingir vestimentas ou para preparar bebidas a partir da fermentação de uvas.

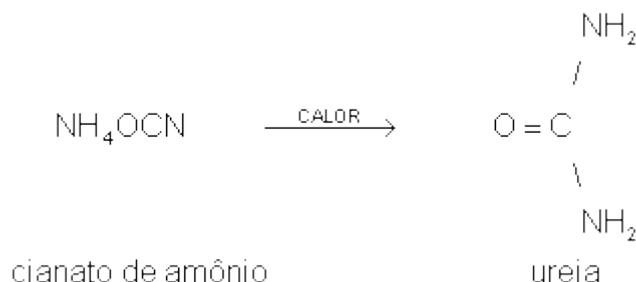
No século XVIII, Carl Wilhelm Scheel conseguiu isolar o ácido tartárico da uva, o ácido cítrico do limão, o ácido láctico do leite, a glicerina da gordura e a ureia da urina.

Por este motivo, em 1777, Torbern Olof Bergman definiu que a Química Orgânica era a química dos compostos existentes nos organismos vivos e que a Química Inorgânica era a química dos minerais.

Neste mesmo período, Antoine Laurent de Lavoisier analisou muitos compostos orgânicos e verificou a presença do elemento químico carbono em todos eles.

Em 1807, o químico sueco Jöns Jakob Berzelius defendeu a teoria da Força Vital, onde somente os seres vivos são capazes de produzir os compostos orgânicos. Isto queria dizer que era impossível obter uma substância orgânica se não fosse a partir de um ser vivo. Não poderiam ser sintetizadas (preparadas artificialmente).

Porém, esta teoria da Força Vital foi derrubada pelo químico alemão Friedrich Wöhler. Em 1828, Wöhler sintetizou a ureia a partir de um composto mineral, de acordo com a reação a seguir:



A partir do cianato de amônio, foi possível sintetizar a ureia, que antes só podia ser obtida através da urina dos animais.

Outras sínteses também foram feitas, como a do metanol e acetileno, também por Wöhler.

Em 1845, Adolphe Wilhelm Hermann Kolbe sintetizou pela primeira vez um composto orgânico a partir de seus elementos químicos. Sintetizou então o ácido acético (vinagre).

Desta época em diante, os químicos acreditavam que qualquer outro composto orgânico poderia ser sintetizado. A ideia de que todo composto orgânico vinha de seres vivos foi abandonada.

Friedrich August Kekulé, em 1858, propôs um novo conceito para Química Orgânica, utilizado até hoje.

“Química Orgânica é a parte da Química que estuda os compostos que contém carbono.”

Se a Química Orgânica estuda os compostos com carbono, a Química Inorgânica estuda os demais compostos, em geral minérios.

Nem toda substância que contém carbono é parte da Química Orgânica. Há algumas exceções, porque apesar de conter carbono, tem comportamento de uma substância inorgânica. São eles: C(grafite), C(diamante), CO, CO<sub>2</sub>, HCN, H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>.

Os compostos orgânicos são, na sua maioria, formados por C, H, O e N. Estes átomos são chamados de elementos organógenos. Os átomos diferentes do carbono, em uma substância orgânica, são chamados de heteroátomos.

A Química Orgânica estuda os compostos que possuem carbono. Atualmente aproximadamente dez milhões são os compostos existentes, mas cerca de nove milhões são de compostos orgânicos.

Uma molécula orgânica complexa pode se quebrar, pois seus átomos adquirirão novas disposições, por um grande número de processos. Há também outros métodos para adicionarem a essa molécula mais átomos ou substituir seus átomos por outros átomos. A Química Orgânica resume-se em identificar essas reações, como elas se realizam e as suas possíveis aplicações na síntese de compostos.

A Química Orgânica é um estudo fundamental para a Biologia e para a Medicina. A Bioquímica estuda as moléculas e suas reações químicas, nos fundamentos da vida. Os processos biológicos analisados pela Química Orgânica, pois ao excluírem a água, os organismos vivos são formados principalmente pelos compostos orgânicos e as moléculas da Biologia Molecular são consideradas moléculas orgânicas.

A expressão “composto orgânico” surgiu há mais de 200 anos, referindo-se às substâncias produzidas por organismos vivos. Atualmente, são chamados assim os compostos que contêm carbono, sejam estes produzidos ou não por organismos vivos.

A química orgânica é a parte da química que estuda as propriedades, métodos de obtenção e aplicações dos compostos formados por átomos de carbono. Possui um papel muito importante na compreensão das propriedades dos plásticos, detergentes, medicamentos, e também dos processos que ocorrem nos seres vivos.

Este átomo apresenta algumas características que o transforma em um elemento peculiar na natureza.

Este átomo possui 4 elétrons em sua camada de valência, e, como é um ametal, pode formar ligações covalentes com outros átomos.

Como vimos no tópico anterior, o carbono faz quatro ligações. Vou repetir: o carbono sempre faz quatro ligações. Essas ligações podem se distribuir de quatro maneiras distintas, podendo aparecer como quatro ligações simples, uma dupla e duas simples, uma tripla e uma simples ou duas duplas.

### **Estudo do Carbono**

Os átomos de carbono apresentam grande capacidade de ligar-se entre si e com outros átomos de elementos químicos através de ligações simples, duplas

e triplas, formando estruturas com seqüências estáveis que são denominadas de cadeias carbônicas. O átomo de carbono de acordo com a sua localização na cadeia carbônica pode ser classificado em:

a) Carbono primário: quando se liga com um único átomo de carbono, este se localiza na extremidade da cadeia carbônica.

Carbono secundário: quando se liga com dois outros átomos de carbono, este átomo se localiza no meio da cadeia carbônica.

Carbono terciário: quando se liga com três outros átomos de carbono, este também se encontra no meio da cadeia carbônica. .

Carbono quaternário: quando se liga com quatro outros átomos de carbono, este também se localiza no meio da cadeia carbônica.

Carbono saturado: quando os átomos de carbono apresentam apenas ligações simples entre si

Carbono insaturado: quando o átomo de carbono esteja ligado a outro átomo de carbono com uma ou mais ligações duplas ou triplas si

Os átomos que estão com asterisco são insaturados

As cadeias carbônicas classificam em:

Cadeia aberta ou acíclica ou alifática: os átomos de carbono ligam-se entre si de modo que tenham extremidade livres, isto é, quando percorrida em qualquer sentido sempre chega a uma extremidade.

Cadeia fechada ou cíclica ou alicíclica: quando os átomos de carbono se ligam entre si de modo a não terem extremidades livres, isto é, quando percorrida em qualquer sentido nunca se chega a uma extremidade.

Cadeia mista ou cadeia fechada ramificada: quando os átomos de carbono se ligam entre si de modo a formarem um círculo com uma ou mais extremidades livres.

### **Classificação das cadeias carbônicas abertas**

Quanto à disposição as cadeias abertas classificam em: Normais ou simples: quando apresentam unicamente átomos de carbono primários ou primários e secundários.

Ramificadas: quando apresentam pelo menos um átomo de carbono terciário ou quaternário

Homogêneas: quando apresentam apenas átomos de carbono ligados entre si

Heterogêneas: quando apresentam pelo menos um átomo diferente do átomo de carbono ligado entre dois átomos de carbono

Saturadas: quando os átomos de carbono estão ligados entre si por ligações simples

Insaturadas: quando apresentam pelo menos dois átomos de carbono ligados entre si por uma ligação dupla ou tripla.

### **Classificação das cadeias carbônicas fechadas**

As cadeias fechadas ou cíclicas classificam em:

Cadeias fechadas alicíclicas: quando percorridas em qualquer sentido não se chega a uma extremidade e não possuem anel benzênico

Cadeias fechadas aromáticas: quando percorrida em qualquer sentido, não se chega a uma extremidade, sendo que a cadeia mais simples contém seis átomos de carbono ligados entre si, com ligações simples e duplas alternadas entre si. As cadeias fechadas aromáticas recebem os nomes de núcleo benzênico ou anel benzênico

### **Classificação das cadeias carbônicas fechadas alicíclicas**

As cadeias fechadas alicíclicas classificam em:

Homocíclicas: quando são constituídas por apenas átomos de carbono

Heterocíclicas: quando apresentam pelo menos um heteroátomo em suas estruturas

Saturadas: quando os átomos de carbono ligam entre si exclusivamente por ligações simples.

Insaturadas: quando apresentam pelo menos uma ligação dupla ou tripla entre dois átomos de carbono

## **Classificação das cadeias carbônicas fechadas aromáticas**

As cadeias fechadas aromáticas classificam em: Aromáticas mononucleares: quando apresentam apenas um núcleo benzênico

Aromáticas polinucleares: quando apresentam dois ou mais núcleos benzênicos

As cadeias fechadas aromáticas polinucleares se classificam em: Polinuclear isolada e polinuclear condensada

Na cadeia aromática polinuclear isolada os anéis não possuem átomos de carbono em comum, já na polinuclear condensada os anéis possuem átomos de carbono em comum.