

Ivan dos Santos Silva  
Sidney Gonçalo de Lima

---

**Abordagem Física  
de Compostos  
Orgânicos**

---

Ivan dos Santos Silva  
Sidney Gonçalo de Lima

# Abordagem Física de Compostos Orgânicos

Atena Editora  
2019

2019 by Atena Editora

Copyright © da Atena Editora

Editora Chefe: Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira

Diagramação e Edição de Arte: Lorena Prestes

Revisão: Os autores

#### Conselho Editorial

- Prof. Dr. Alan Mario Zuffo – Universidade Federal de Mato Grosso do Sul  
Prof. Dr. Álvaro Augusto de Borba Barreto – Universidade Federal de Pelotas  
Prof. Dr. Antonio Carlos Frasson – Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
Prof. Dr. Antonio Isidro-Filho – Universidade de Brasília  
Profª Drª Cristina Gaio – Universidade de Lisboa  
Prof. Dr. Constantino Ribeiro de Oliveira Junior – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
Profª Drª Daiane Garabeli Trojan – Universidade Norte do Paraná  
Prof. Dr. Darllan Collins da Cunha e Silva – Universidade Estadual Paulista  
Profª Drª Deusilene Souza Vieira Dall’Acqua – Universidade Federal de Rondônia  
Prof. Dr. Eloi Rufato Junior – Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
Prof. Dr. Fábio Steiner – Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul  
Prof. Dr. Gianfábio Pimentel Franco – Universidade Federal de Santa Maria  
Prof. Dr. Gilmei Fleck – Universidade Estadual do Oeste do Paraná  
Profª Drª Girlene Santos de Souza – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia  
Profª Drª Ivone Goulart Lopes – Istituto Internazionele delle Figlie de Maria Ausiliatrice  
Profª Drª Juliane Sant’Ana Bento – Universidade Federal do Rio Grande do Sul  
Prof. Dr. Julio Candido de Meirelles Junior – Universidade Federal Fluminense  
Prof. Dr. Jorge González Aguilera – Universidade Federal de Mato Grosso do Sul  
Profª Drª Lina Maria Gonçalves – Universidade Federal do Tocantins  
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte  
Profª Drª Paola Andressa Scortegagna – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
Profª Drª Raissa Rachel Salustriano da Silva Matos – Universidade Federal do Maranhão  
Prof. Dr. Ronilson Freitas de Souza – Universidade do Estado do Pará  
Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista  
Prof. Dr. Urandi João Rodrigues Junior – Universidade Federal do Oeste do Pará  
Prof. Dr. Valdemar Antonio Paffaro Junior – Universidade Federal de Alfenas  
Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande  
Profª Drª Vanessa Lima Gonçalves – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
Prof. Dr. Willian Douglas Guilherme – Universidade Federal do Tocantins

#### Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) (eDOC BRASIL, Belo Horizonte/MG)

S586a Silva, Ivan dos Santos.  
Abordagem física de compostos orgânicos [requisitos de sistema] / Ivan dos Santos Silva, Sidney Gonçalo de Lima. – Ponta Grossa (PR): Atena Editora, 2019. – (Ciências da Saúde; v. 1)

Formato: PDF  
Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader  
Modo de acesso: World Wide Web  
Inclui bibliografia  
ISBN 978-85-7247-120-6  
DOI 10.22533/at.ed.206191902

1. Química orgânica. I. Lima, Sidney Gonçalo de. II. Título.  
III. Série.

CDD 547

**Elaborado por Maurício Amormino Júnior – CRB6/2422**

O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores.

2019

Permitido o download da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos aos autores, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

[www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br)

## **AGRADECIMENTOS**

Aos pesquisadores do grupo de Geoquímica Orgânica da UFPI (LAGO – UFPI), especialmente, Raiane Morais, Andrenilton Silva, Edymilais Sousa e Márcio Rocha;

Ao colega Prof. Tadeu Mendes, pelas críticas e sugestões;

À professora Lindalva Nascimento, pela revisão ortográfica; Artur Barros e Lorena Tuane, pela formatação do texto;

Ao Prof. Alex Romero, amigo e companheiro de trabalho, pelas valiosas informações a respeito deste livro;

Aos nossos alunos do presente e do passado, que sempre nos incentivaram escrever um livro de Química Orgânica, nossos sinceros agradecimentos.



## APRESENTAÇÃO

*Abordagem Física de Compostos Orgânicos* foi elaborado para ser utilizado por profissionais de química e áreas afins e, especialmente, para alunos do ensino médio, pois trata de preencher algumas lacunas com relação às propriedades físicas dos compostos orgânicos, uma vez que a maioria dos livros de Química tratam esse conteúdo de forma secundária, porém os exames de vestibulares cobram bastante. O livro trata de relacionar as estruturas moleculares em seus vários aspectos com as constantes físicas da maioria das funções orgânicas bem como fornecer subsídios para uma melhor compreensão dos diversos temas envolvidos, entre eles, densidade, solubilidade e mudanças de fase. No texto, as propriedades físicas de diversas classes funcionais são detalhadas de uma forma fluida, clara e objetiva para que o leitor entenda perfeitamente as diversas relações entre os temas abordados.

O livro trata de um tema bastante relevante, pois as características físicas de substâncias orgânicas estão profundamente relacionadas às aplicações práticas desses compostos como fármacos, combustíveis, agentes de limpeza, plásticos, borrachas, tintas e muitos outros. Enfim, esse pequeno texto pretende revelar uma das faces mais importantes da Química como uma das ciências centrais do conhecimento humano.

## PREFÁCIO

Desde a revolução industrial, têm-se aumentado a descoberta de novas substâncias químicas presentes nos diversos materiais. Nesse contexto, destacam-se as substâncias orgânicas, as quais são muito importantes para as indústrias dos medicamentos, das tintas, dos perfumes, dos alimentos, entre outras, que contribuem direta ou indiretamente para o crescimento e conforto da população.

Por outro lado, essas indústrias também contribuem para o aumento da poluição ambiental. Dessa forma, torna-se necessário conhecer as propriedades químicas e físicas dessas substâncias para exigir o tratamento correto delas e, assim, tentar ajudar a reduzir o impacto ambiental.

Assim, este livro explica de forma didática as propriedades físicas das principais funções orgânicas e seus derivados, enfatizando os hidrocarbonetos, as funções oxigenadas, nitrogenadas, sulfuradas, os compostos halogenados e, por fim, faz-se uma abordagem sobre as ciclodextrinas, que são polissacarídeos obtidos a partir da degradação enzimática do amido por ação da enzima ciclodextrina-glicosil-transferase (GCTase), e tem sido bastante usada na complexação de princípios biofarmacologicamente ativos, visando uma melhora sensível em suas propriedades físico-químicas.

Para uma melhor compreensão, os autores utilizam de sua vasta experiência sobre o tema e faz uma explanação sobre as ligações intermoleculares, massa molar, polaridade e simetria, que são os fatores mais utilizados para justificar as diferenças entre as propriedades físicas das substâncias moleculares.

Ressalta-se o fato de os autores apresentarem os valores de algumas dessas propriedades, tais como ponto de ebulição, ponto de fusão e solubilidade e, principalmente, explicar de forma clara os motivos das diferenças dos valores entre as substâncias, assim como interligar com suas aplicações práticas. Também foram apresentadas algumas reações químicas que ajudaram a entender a importância do solvente no laboratório e na dispersão dessas substâncias no meio ambiente.

Enfim, trata-se de uma leitura adequada para os apaixonados em entender o comportamento físico, bem como as diversas aplicações das substâncias orgânicas, quer estejam no ensino médio, cursos técnicos, fazendo graduação ou pós-graduação em Química ou em áreas afins.

Professor Tadeu Mendes de Sousa Costa

## SUMÁRIO

INTRODUÇÃO .....	1
NOMENCLATURA .....	3
FORÇAS INTERMOLECULARES.....	8
PROPRIEDADES MOLECULARES.....	15
PROPRIEDADES FÍSICAS.....	20
HIDROCARBONETOS .....	26
FUNÇÕES OXIGENADAS.....	37
FUNÇÕES NITROGENADAS.....	50
FUNÇÕES SULFURADAS .....	56
COMPOSTOS HALOGENADOS.....	61
COMPLEXO DE INCLUSÃO .....	64
SOBRE OS ORGANIZADORES.....	72

A Química Orgânica contém milhões de compostos distribuídos em várias classes funcionais que apresentam um amplo espectro de aplicações práticas na atualidade: medicamentos, alimentos, plásticos, combustíveis, tintas, adesivos, vernizes, aditivos de alimentos, dentre outras. Essa enorme quantidade de substâncias orgânicas se relaciona por meio de propriedades químicas e físicas.

As propriedades físicas dependem da estrutura molecular (polaridade, massa molecular, simetria e número de ramificações). As interações microscópicas que ocorrem entre as moléculas de uma substância pura determinam as propriedades macroscópicas que são observadas na prática. A ligação química predominante na Química Orgânica é a covalente, na qual pares de elétrons são compartilhados entre átomos. A ligação covalente pode ser de dois tipos: apolar e polar. A apolar une átomos de um mesmo elemento químico, por isso, não há produção de polaridade. A polar une átomos de elementos distintos, em que o mais eletronegativo gera o polo negativo. As ligações polares associam um vetor denominado de “momento de dipolo”. A soma desses vetores determina a polaridade total da molécula que está relacionada à geometria.

Os compostos orgânicos possuem propriedades físicas que, na maioria das vezes, são explicadas pela análise de suas estruturas químicas. Essas análises são importantes também na previsão de propriedades físicas de compostos desconhecidos, implicando uma série de desdobramentos nas aplicações práticas dessas substâncias. A Química relaciona a estrutura das moléculas com a sua vizinhança, isto é, interliga o mundo microscópico com o macroscópico.

As propriedades físicas assumem enorme importância nas diversas aplicações práticas das substâncias orgânicas. Um exemplo marcante desse fato é a vulcanização da borracha natural, processo descoberto por Goodyear. A borracha natural não vulcanizada se apresenta quebradiça quando é resfriada e funde facilmente quando aquecida. A vulcanização contornou esses problemas, por meio da adição de enxofre que aumentou a resistência mecânica da borracha. Outro exemplo prático da importância das propriedades físicas é o fato de a reserva energética dos organismos vivos ocorrer na forma de lipídios e não na forma de carboidratos. Os açúcares são poliálcoois, logo, as ligações de H iriam incorporar uma enorme quantidade de água, o que iria dificultar até a locomoção dos seres vivos. Os lipídios não apresentam esse inconveniente, uma vez que suas moléculas são apolares ou fracamente polares, isto é, hidrofóbicas.



O presente trabalho tem por objetivo principal preencher as lacunas existentes nos livros de Ensino Médio sobre propriedades físicas dos compostos orgânicos. Neste livro, as relações dos compostos são mostradas por meio de suas propriedades físicas, especialmente ponto de fusão (PF), ponto de ebulição (PE), densidade e solubilidade. As comparações foram mostradas com auxílio de desenhos, gravuras, quadros e tabelas.

Os três capítulos iniciais do livro mostram as relações das principais propriedades das moléculas (como a massa molecular, polaridade e forças intermoleculares) que afetam diretamente suas constantes físicas. As propriedades físicas como ponto de fusão e ponto de ebulição serão descritas sob pressão normal, isto é, 1 atm.

Os capítulos seguintes relatam as variações das propriedades físicas das principais classes de compostos orgânicos que foram agrupados em hidrocarbonetos, funções oxigenadas, funções nitrogenadas e funções sulfuradas. Algumas reações de obtenção de compostos mais conhecidos (como a aspirina) também foram mostradas. Um capítulo sobre complexo de inclusão de princípios ativos em ciclodextrinas (polissacarídeo) foi acrescentado e trata, especialmente, do resultado de pesquisa dos autores sobre a microencapsulação de uma cetona (sulcatona) numa ciclodextrina ( $\beta$ -CD), produzindo um sistema estável que poderá ser utilizado como fármaco, devido a sua atividade vasorrelaxante (hipotensora).

A nomenclatura de compostos orgânicos ainda conserva nomes anteriores à elaboração das regras sistemáticas da IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) que, em Português, significa União Internacional de Química Pura e Aplicada, cuja sede mundial fica na cidade de Zurique (Suíça). Esses nomes não sistemáticos foram denominados de triviais e, na maioria das vezes, fazem uma referência à origem do composto orgânico, tendo como exemplos:

1) O bálsamo de tolu, óleo extraído da árvore *Toluiфера balsamum*, cujo constituinte mais abundante é um hidrocarboneto líquido de PF= -95 °C e PE= 111 C, que foi chamado de tolueno.

2) Os isômeros *orto*-xileno, *meta*-xileno e *para*-xileno (**Figura 1**) foram obtidos pela destilação da madeira que em grego é *xylon*.

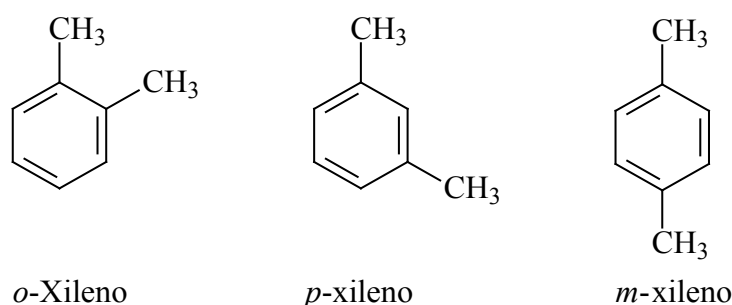


Figura 1- Isômeros orto-xileno, meta-xileno e para-xileno.

A origem dos nomes triviais também está relacionada a pessoas e lugares que foram importantes na aplicação de alguns compostos orgânicos. A nicotina (Figura 2) recebeu esse nome do embaixador francês Jean Nicot que, em 1560, difundiu o tabaco na Europa. Outro caso é o da iperita ou gás mostarda, arma química utilizada pelos alemães contra os britânicos na cidade belga de Ypres. Essa batalha causou a morte de mais de 2000 soldados.

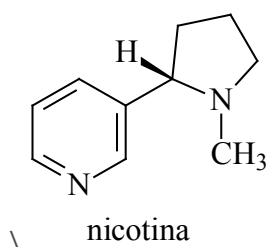


Figura 2- Estrutura molecular da nicotina.

O nome trivial apresenta a vantagem de ser mais simples que o nome sistemático e a desvantagem de não informar pistas a respeito da estrutura da molécula orgânica. Vejamos exemplos das duas situações: o nome trivial aspirina é muito mais simples que ácido *orto*-acetiloxibenzoico (**Figura 3**), nome sistemático do medicamento mais comercializado no planeta, conhecido também como ácido acetilsalicílico (AAS).

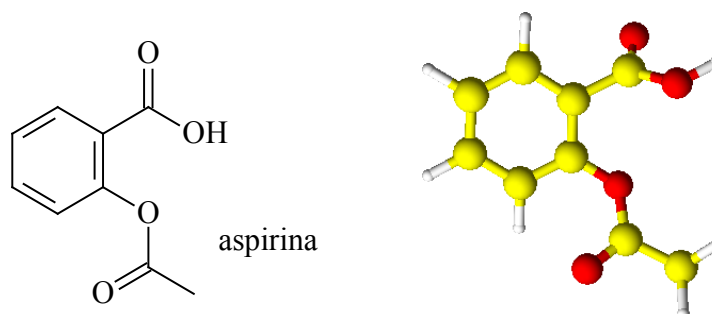


Figura 3- Estrutura molecular do ácido orto-acetiloxibenzoico (aspirina).

A cetona acíclica, saturada e contendo três átomos de carbono, possui nome sistemático de propanona e nome trivial de acetona, que informa apenas tratar-se de uma cetona. Em muitos casos, os nomes triviais induzem ao erro. Ácido acético, acetileno, acetamida e o grupo acetil são estruturas contendo dois átomos de carbono, porém acetona possui três (**Figura 4**).

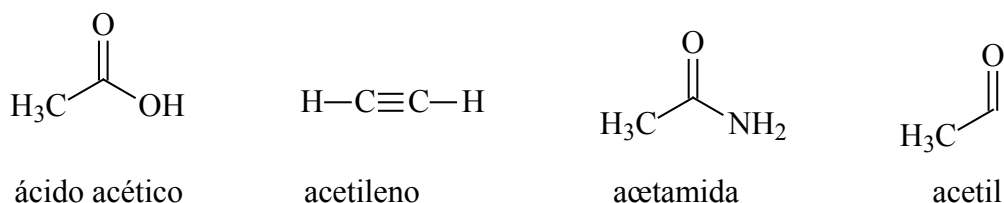
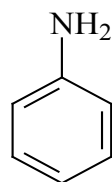


Figura 4- Estrutura molecular do ácido acético, acetileno, acetamida e grupo acetil.

A nomenclatura IUPAC, ou sistemática, permite atribuir mais de um nome para um composto desde que não exista ambiguidade. A anilina (**Figura 5**), nome trivial de uma amina importantíssima, apresenta nomes sistemáticos de fenilamina, aminobenzeno e benzenamina. Um fato importante é que um nome IUPAC jamais corresponderá a dois ou mais compostos diferentes, isto é, um nome sistemático só poderá ser atribuído a uma única substância.



Anilina

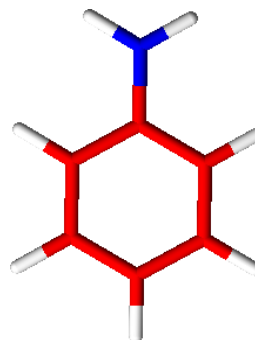
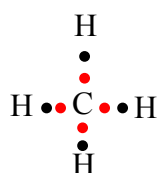


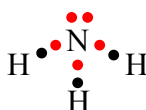
Figura 5- Estrutura molecular da anilina.

As fórmulas moleculares nos informam apenas sobre a composição elementar dos compostos, não há qualquer indicação de como os átomos estão unidos uns aos outros, seu arranjo espacial. Por outro lado, as fórmulas estruturais mostram como os átomos se unem para formar as moléculas. Existem várias maneiras de se representar as moléculas estruturais dos compostos orgânicos, como mostrado na **Figura 6** para um *n*-alcano cuja fórmula molecular é  $C_6H_{14}$  (fórmula geral =  $C_nH_{2n+2}$ ).

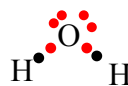
✓ **Fórmula de pontos: estrutura de Lewis ou fórmulas eletrônicas**



metano



amônia

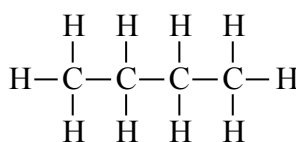


água



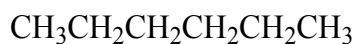
ácido fluorídrico

✓ **Fórmula de traços (estrutura de Kekulé):**

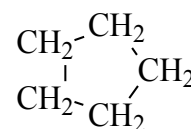


*n*-butano

✓ **Fórmula condensada**

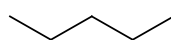


*n*-hexano

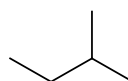


ciclopentano

✓ **Fórmula de linhas**



*n*-pentano

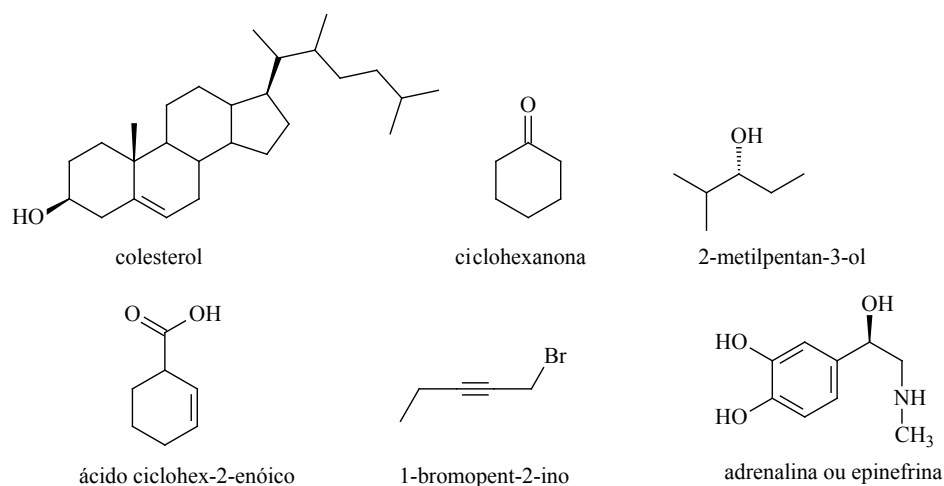




2-metilbutano

Figura 6- Maneiras diversas de representar as moléculas estruturais dos compostos orgânicos.

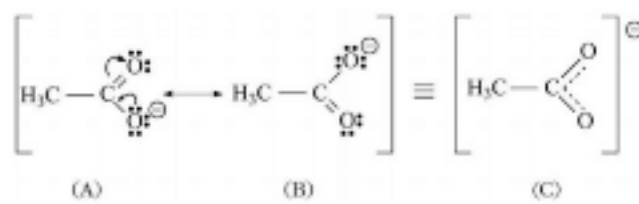
Para moléculas com muitos átomos as três primeiras representações podem

se tornar confusas ou inconvenientes. A fórmula de linhas, esqueleto carbônico representado por linhas em zigue-zague, na qual cada linha curta representa uma ligação e em cada vértice ou extremidade há um átomo de carbono. Os átomos de hidrogênio são omitidos. Quando há ligações duplas ou triplas, representa-se por meio de duas ou três linhas. Heteroátomos ou grupos funcionais devem ser representados como nos exemplos da, **Figura 7**:



**Figura 7-** Representações de moléculas em fórmula de linhas. As ligações em cunha cheia e traços, como no exemplo do colesterol e do 2-metilpentan-3-ol, significa que a ligação está saindo (  ) e entrando (  ) no plano do papel, respectivamente.

Em alguns casos, não é possível escrever adequadamente a estrutura eletrônica das espécies químicas, por meio de uma única estrutura de Lewis. Vejamos o exemplo para o grupo funcional acetato, **Figura 8**:



**Figura 8-** Estruturas de ressonância para o grupo acetato.

As estruturas A e B diferem apenas na distribuição dos elétrons, apresentam mesma energia. A ligação C-O, que é dupla em A, é simples em B, e vice-versa. Por causa da rápida deslocalização dos pares de elétrons, experimentos em raios X mostram que as duas ligações C-O apresentam mesmo comprimento. Assim, as duas fórmulas A e B são adequadas para representar o íon acetato. A estrutura desses íons seria melhor representada pela estrutura C, conhecido com HÍBRIDO DE RESSONÂNCIA.

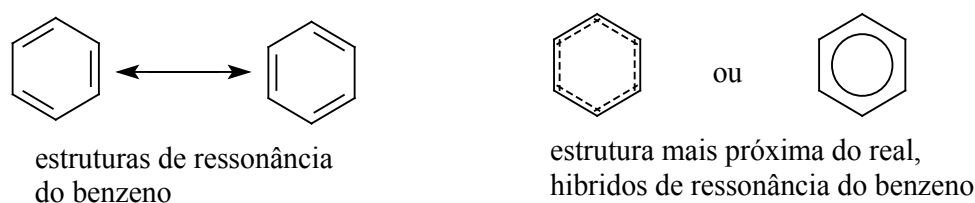
Sempre que uma molécula ou um íon puderem ser representados por duas ou mais estruturas de Lewis (estruturas de ressonância), cuja única diferença é a posição

dos elétrons, teremos:

✓ Nenhuma dessas estruturas, que são chamadas de estruturas de ressonância ou contribuintes de ressonância, será a representação correta para a molécula ou íon.

✓ A molécula ou íon será melhor representada por um híbrido de ressonância.

Todos os compostos que possuem em sua estrutura ligações duplas alternadas com ligações simples (-C=C-C-), ou heteroátomos com pares de elétrons livres ligados a carbono  $sp^2$  podem apresentar esse fenômeno da ressonância. O mais famoso de todos eles é o **benzeno**, cuja estrutura foi proposta em 1865, pelo químico alemão Friedrich August Kekulé (1829-1896). Sua estrutura seria cíclica e formada por três ligações duplas intercaladas com três ligações simples, conforme a **Figura 9** abaixo:



**Figura 9-** Estruturas de ressonância para o benzeno.

As duas formas de representar o benzeno são aceitas, pois é possível mudar os elétrons das ligações  $\pi$  sem mudar a posição dos átomos. Entretanto, nenhuma representa exatamente o que ele é e nem explica seu comportamento.

Neste livro, o leitor vai encontrar as nomenclaturas IUPAC e trivial, uma vez que as vantagens de cada uma foram levadas em consideração. A maioria dos exames de vestibulares fazem o mesmo, pois em uma questão é importante cobrar do candidato informações da molécula, tais como massa molecular, número de centros quirais ou índice de deficiência de hidrogênio (IDH). O IDH constitui um importante parâmetro a respeito da estrutura molecular e auxilia na determinação da fórmula bruta do composto. Nas questões que apresentam estruturas moleculares complexas, como carboidratos ou lipídios, a nomenclatura é mais utilizada, pois os objetivos são outros que o nome trivial não pode informar.

Com relação a representação das moléculas, desenho no plano, há várias maneiras de se representar as fórmulas estruturais dos compostos, entretanto, muitos escolhem a maneira que julgam mais conveniente, mais simples, em função dos detalhes que se deseja chamar a atenção. Aqui, nós decidimos na maior parte da escrita as fórmulas de linha (Bond Line).



# FORÇAS INTERMOLECULARES

As substâncias orgânicas são constituídas por moléculas discretas que, por sua vez, apresentam átomos unidos por covalência, isto é, uma ligação química que se deve ao emparelhamento de elétrons, resultando na formação de um orbital molecular que pode ser do tipo *sigma* ( $\sigma$ ) ou *pi* ( $\pi$ )<sup>\*1</sup>. Assim, as moléculas interagem com outras moléculas por meio de forças intermoleculares que dependem das seguintes propriedades: massa molecular, polaridade, simetria e superfície de contato. Este capítulo relata como essas propriedades moleculares afetam as forças intermoleculares e, conseqüentemente, as propriedades físicas dos compostos orgânicos.

## 1 | FORÇAS INTERMOLECULARES

As forças intermoleculares são de natureza elétrica e podem ser de três tipos: interações dipolo-dipolo, ligações de hidrogênio e forças de Van der Waals. Os PF e PE das substâncias dependem profundamente das forças intermoleculares. Essas interações são enormemente afetadas pela massa molecular (MM), pois moléculas semelhantes, isto é, da mesma função orgânica, que possuem o mesmo tipo de polaridade e cadeia carbônica, apresentam pontos de fusão (PF) e pontos de ebulição (PE) distintos, quando as MM variam muito, como é possível observar nos exemplos da **Figura 10**.

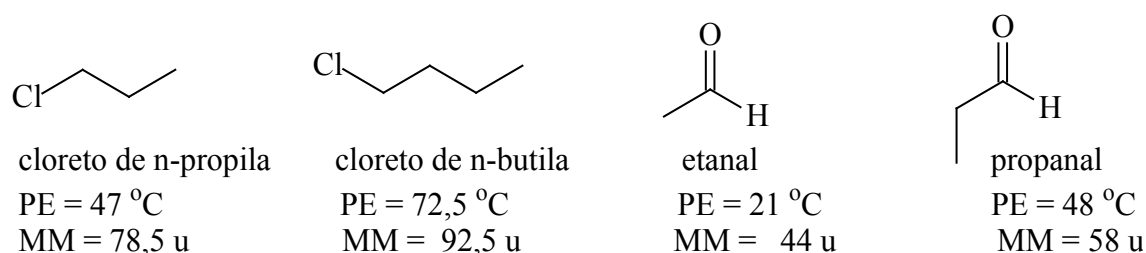


Figura 10- Variação do PF e PE com tamanho da cadeia carbônica.

### 1.1 FORÇAS DE VAN DER WAALS

Decorrem do movimento desordenado dos elétrons nas moléculas, gerando dipolos instantâneos que atraem moléculas vizinhas. As forças de “Van der Waals”

<sup>1</sup> O emparelhamento de elétrons resulta na formação de dois orbitais moleculares, sendo um deles ligante e o outro antiligante. As informações desse livro abordam somente os conteúdos de Ensino Médio, por isso o orbital molecular antiligante não será relatado.

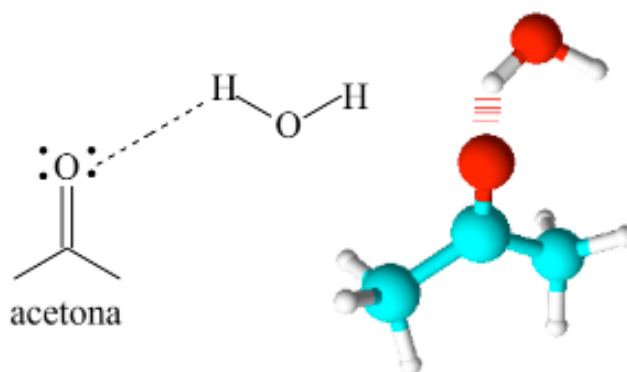
ocorrem entre quaisquer tipos de moléculas, independentemente de sua polaridade. No caso das substâncias apolares, são as únicas interações que ocorrem entre as moléculas. As forças de van der Waals são também conhecidas por forças de dispersão de London e dependem profundamente da massa molecular, pois moléculas mais pesadas possuem mais elétrons, produzindo um maior número de interações. Elas dependem também da superfície de contato e da capacidade de deformação da nuvem eletrônica, fenômeno conhecido com polarizabilidade. À medida que a superfície de contato cresce, aumentam os números de interações entre as moléculas. Logo, será mais difícil de a substância mudar de fase. Isso explica o fato de haver maior volatilidade do composto apolar SF<sub>6</sub>, em relação ao C<sub>10</sub>H<sub>22</sub>, que é também uma substância apolar. A molécula octaédrica do SF<sub>6</sub> é muito mais compacta que a molécula longa do C<sub>10</sub>H<sub>22</sub>, por isso o fluoreto é um gás e o hidrocarboneto é um líquido, nas condições ambientes (25 °C e 1 atm).

Substâncias com MM próximas possuem forças de Van der Waals semelhantes em intensidade. Como exemplo, pode-se mencionar a água (H<sub>2</sub>O), amônia (NH<sub>3</sub>) e metano (CH<sub>4</sub>) com MM, respectivamente, iguais a 18 u, 17 u e 16 u que possuem forças de Van der Waals da ordem de 8,4 kJ mol<sup>-1</sup> a 25 °C e 1 atm.

## 1.2 INTERAÇÕES DIPOLO-DIPOLO

As interações dipolo-dipolo são resultantes da distribuição não uniforme dos elétrons não ligantes e são conhecidas como forças de Keesom. Uma molécula polar tende a se orientar atraindo outra molécula, em que a extremidade positiva de uma atrai a extremidade negativa da outra. Essas interações ocorrem nas fases sólida e líquida, pois, na fase gasosa, as moléculas estão muito afastadas e as forças elétricas diminuem com a distância. A acetona (C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>O) é um líquido nas condições ambientes e suas moléculas são mantidas nessa fase por interações dipolo-dipolo, porque a acetona é constituída por moléculas polares.

Vale ressaltar também que moléculas orgânicas oxigenadas, contendo cadeias carbônicas pequenas (até quatro átomos de carbono), estabelecem ligações de H com a água, o que resulta na formação de soluções. Isso explica, por exemplo, a dissolução de acetona em água, ilustrada na **Figura 11**, em que a linha tracejada representa as ligações de H entre as moléculas de água e acetona.



**Figura 11-** Ligações de H entre as moléculas de água e acetona. Os pares de elétrons isolados são ligeiramente mais repulsivos que os elétrons de ligação, então o ângulo (104.5 °C) entre as ligações O-H é ligeiramente menor do que o ângulo de um tetraedro regular (109 °C).

Comparando compostos polares com apolares de MM próximas, na

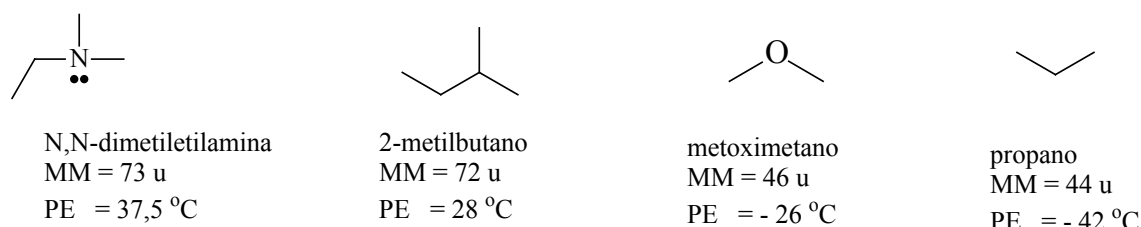


Figura 12, verifica-se que os primeiros apresentam maiores ponto de ebulição (PE), pois as interações dipolo-dipolo são mais intensas que as existentes entre as moléculas das substâncias apolares.

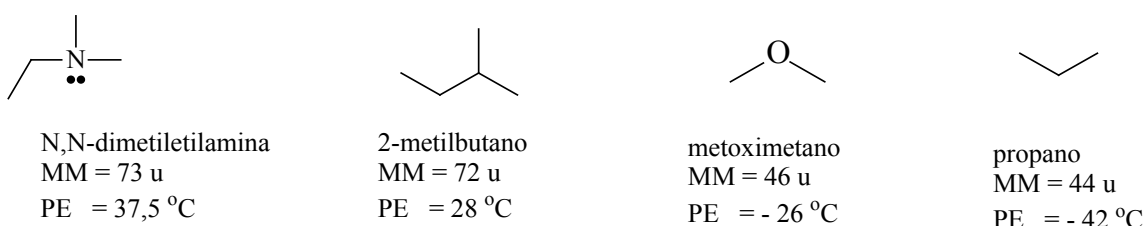


Figura 12- Compostos polares como a N,N-dimetilamina e metóxiopropano possuem maiores PE que os compostos apolares 2-metilbutano e propano.

### 1.3 Ligações de Hidrogênio (LH<sub>2</sub>) x Pontes de Hidrogênio

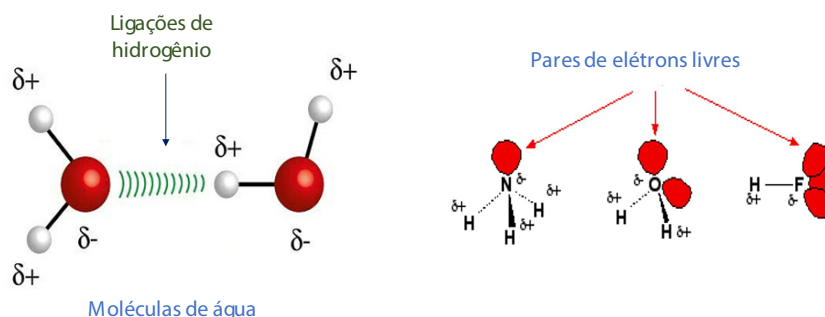
Uma ligação de hidrogênio (LH) é um tipo de interação dipolo-dipolo; não é uma ligação química verdadeira. Essas atrações podem ocorrer entre moléculas (interação intermoleculares) ou em diferentes partes de uma única molécula (interação intramolecular). A LH, muitas vezes erroneamente referenciada como ponte de hidrogênio (ver exemplo para a diborana abaixo), é um dos tipos de interação intermolecular, que confere certa estabilidade nas ligações com átomos de alta

eletronegatividade.

A ligação de hidrogênio é importante, especialmente, porque é fundamental para toda a vida na Terra, e podemos citar três razões pelas quais a LH é importante:

1. O DNA tem uma estrutura de dupla hélice, porque as LHs mantêm unidos os pares de bases ao centro. Sem LHs, o DNA, certamente, existiria como uma estrutura diferente;
2. A água tem um ponto de ebulição relativamente alto devido às ligações de hidrogênio. Sem LHs entraria em ebulição a uma temperatura bem inferior a 100 °C. A água nos oceanos e lagos rapidamente evaporaria. Isso causaria problemas enormes para a vida na Terra;
3. As LHs são importantes na formação das estruturas secundárias das proteínas. A molécula de hemoglobina consiste em quatro subunidades. As proteínas nas subunidades são enroladas em hélices que são mantidas unidas por LHs. Sem as LHs para manter sua forma, a hemoglobina seria incapaz de funcionar:

As LH<sub>s</sub> são consideradas um caso extremo de interações dipolo-dipolo que ocorre quando uma molécula possui H ligado a N, O ou F. As ligações covalentes H-F, H-O e H-N são muito polarizadas devido à grande diferença de eletronegatividade. As ligações de H são mais fracas que as ligações covalentes, mas são muito mais fortes que as interações dipolo-dipolo. Elas explicam o fato de o álcool etílico (CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH) ter um PE= +78,3 °C (1atm), bem mais alto que o éter dimetílico (CH<sub>3</sub>OCH<sub>3</sub>) cujo PE= -24,9 °C a 1 atm, embora os dois compostos tenham a mesma massa molecular. As ligações de H são frequentemente representadas por uma ligação pontilhada que une o átomo de H de uma molécula ao par de elétrons livres do átomo de F, O ou N de outra molécula. A **Figura 13** representa as ligações de H entre moléculas de água na fase líquida.



**Figura 13-** Ligações de hidrogênio entre moléculas de água na fase líquida.

No desenho a direita, os pares isolados, destacados em vermelho, são responsáveis pela ligação de hidrogênio na H<sub>2</sub>O. A linha sólida representa uma ligação no plano do papel. As ligações pontilhadas estão voltando para o papel, para longe de

você, e as em forma de cunha estão saindo na sua direção.

Os PE dos álcoois são superiores aos das aminas primárias e secundárias, o que pode ser explicado pelo fato de ser maior a eletronegatividade do oxigênio em relação ao nitrogênio, o que determina ligações de H mais intensas nos álcoois, **Figura 14**.

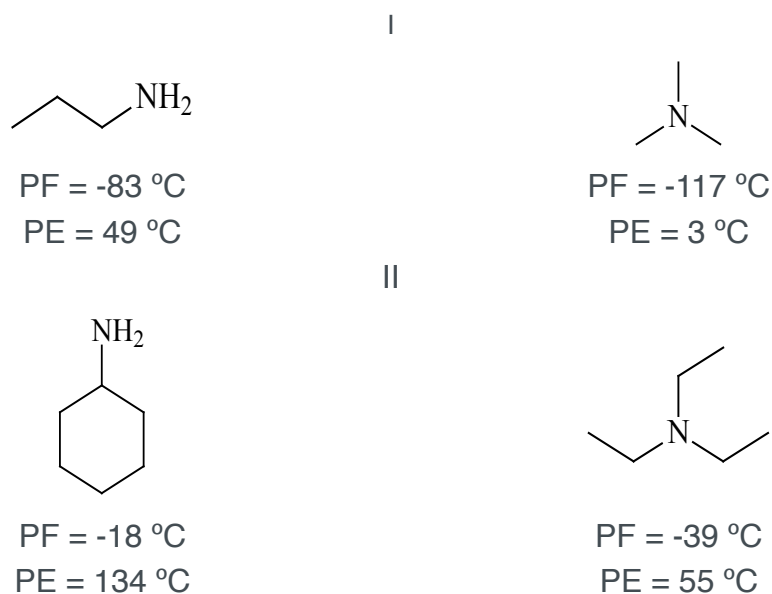


Figura 14- Ponto de ebulição do Álcool Butílico e da Butilamina.

O álcool butílico apresenta solubilidade de 7,9 g em 100 g de água a 20 °C e, nas mesmas condições, a butilamina é solúvel em água em todas as proporções. Isso se deve à maior basicidade das aminas em relação aos álcoois.

As aminas terciárias possuem menores PF e PE que as primárias e secundárias, porque nas terciárias não existe associação molecular por ligações de H, pois a ligação covalente N-H não está presente. A

**Figura 15** compara os PF e PE de dois pares de aminas, mostrando a influência das ligações de H sobre essas propriedades físicas.



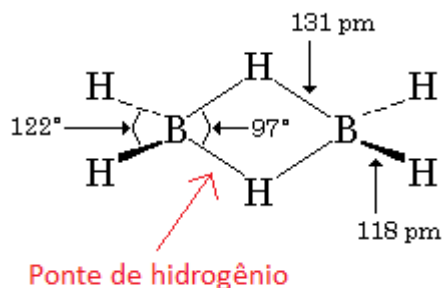
**Figura 15**– Par (I) PF e PE de amina primária e amina terciária. Par (II) PF e PE de amina secundária e amina terciária.

A primeira explicação da menor basicidade do hidróxido de trimetilamônio (I) em relação ao hidróxido de tetrametilamônio (II) foi dada pelas ligações de H. No composto I, as ligações de H entre o ânion OH<sup>-</sup> e o átomo de H do cátion trimetilamônio dificulta a dissociação da base e conseqüentemente sua força diminui em relação ao





pois, mesmo que possuam tal espécie em comum, apresentam situações distintas: as  $\text{PH}_3$  representam um arranjo molecular constituído por 2 elétrons divididos entre 3 átomos (3 centros, 2 elétrons), conforme mostrado para a **diborana**, um composto químico constituído por boro (B) e hidrogénio (H) com a fórmula  $\text{B}_2\text{H}_6$ . É um gás pirofórico incolor e instável a temperatura ambiente:



**Figura 18-** Estrutura típica do composto diborana.

Os dois átomos centrais de hidrogênio estão simultaneamente ligados a ambos os átomos de boro em ligações ligação três centros dois elétrons ( $3c-2e$ ). Este tipo de ligação é vista em vários compostos de boro, como a diborana,  $\text{B}_2\text{H}_6$ ; o monômero  $\text{BH}_3$  é instável já que o átomo de boro possui 6 elétrons de valência e, portanto, para formar um octeto estável compartilha elétrons com uma ligação B-H a outro átomo de boro, formando uma ligação B-H-B. Este tipo de ligação é visto também no trimetilalumínio ( $\text{Al}(\text{Me})_3$ ).

Na diborana ( $\text{B}_2\text{H}_6$ ), dois átomos de boro estão ligados entre si pela presença de átomos de hidrogênio que formam, literalmente, uma ponte entre eles. Assim, a espécie  $\text{BH}_3$  não é evidenciada, mas o seu dímero.

# PROPRIEDADES MOLECULARES

As propriedades físicas resultantes das propriedades moleculares são abordadas neste livro, são ponto de fusão, ponto de ebulição, densidade e solubilidade. As três primeiras ocorrem entre moléculas de uma mesma substância, enquanto a solubilidade relata interações entre moléculas de substâncias distintas. O capítulo também faz uma abordagem do papel da constante dielétrica do solvente e a sua relação com a temperatura. As propriedades moleculares discutidas foram: massa molecular, polaridade, simetria molecular.

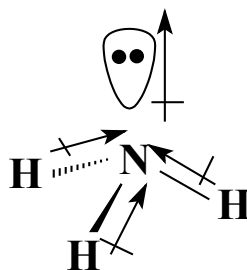
## 2 | MASSA MOLECULAR (MM)

A massa molecular afeta as temperaturas de fusão e ebulição, pois à medida que as moléculas se tornam mais pesadas, mais intensas ficam as forças intermoleculares, dessa forma, as energias necessárias para efetuar a fusão e a ebulição serão maiores. Os hidrocarbonetos etano, hexano e pentacosano são obtidos por meio da destilação do petróleo e ilustram o efeito do aumento da MM sobre as fases de agregação.

O etano (MM=30 u) é um constituinte do gás natural, o hexano (MM = 86 u) é uma substância líquida utilizada largamente como solvente laboratorial e o pentacosano (MM = 352 u) é um sólido da parafina utilizada como vela de iluminação.

### 2.1 POLARIDADE

A ligação covalente que une átomos de elementos distintos é polarizada, porque o par de elétrons não está compartilhado igualmente entre eles, logo o átomo mais eletronegativo tende a atrair o par de elétrons para si, causando a polarização da ligação covalente. Essa polarização pode ser representada por um vetor denominado momento de dipolo ( $\mu$ ), que aponta para o átomo mais eletronegativo ou para um par de elétrons. Na molécula do amoníaco (NH<sub>3</sub>) existem quatro vetores associados, dos quais três apontam para o átomo de N e outro, que tem origem no seu núcleo, aponta para o par de elétrons não compartilhado, **Figura 19**



**Figura 19**– vetores momento de dipolo na molécula de amoníaco.

O módulo de  $\mu$  é dado pela Equação 1:

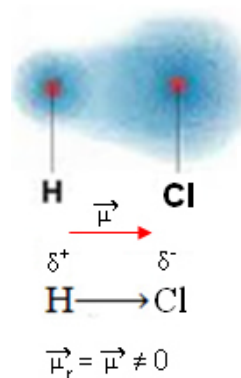
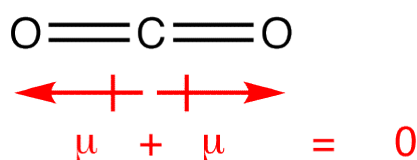
$$\mu = q \times d \quad (1)$$

$q$  = fração da carga elementar ( $e$ ) em coulomb (C)

$d$  = comprimento da ligação

No SI a unidade de  $\mu$  é o *debye* (D) e 1D corresponde a  $3,336 \times 10^{-30} \text{C.m}$ .

As moléculas polares são aquelas que possuem um momento de dipolo resultante ( $\mu_R$ ) diferente de zero, por isso, são chamadas de dipolos permanentes. Existem moléculas que possuem ligações polares, mas apresentam  $\mu_R$  igual a zero. O  $\mu_R$  depende da geometria da molécula. O dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) possui duas ligações polares, mas a molécula é apolar porque a geometria é linear, na qual os vetores  $\mu$  são cancelados, como mostrado na **Figura 20**.



**Figura 20**– vetores momento de dipolo para a moléculas de  $\text{CO}_2$  e  $\text{HCl}$ .

As moléculas diatômicas constituídas por átomos do mesmo elemento químico serão apolares, pois apresentam a mesma eletronegatividade, o que determina  $\mu_R$  nulo. A **Tabela 1** mostra os momentos de dipolo de alguns compostos orgânicos e inorgânicos, destacando o fato de a acetona ( $\text{CH}_3\text{COCH}_3$ ) e dimetilsulfóxido ( $\text{CH}_3\text{SOCH}_3$ ) possuírem maiores  $\mu_R$  superiores ao da água. Ácidos carboxílicos e álcoois possuem  $\mu_R$  próximos e inferiores ao da água.

Fórmula	$\mu(D)$	Fórmula	$\mu(D)$
H <sub>2</sub>	0	CH <sub>4</sub>	0
Cl <sub>2</sub>	0	CH <sub>3</sub> Cl	1,87
HF	1,83	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	1,55
HCl	1,08	CHCl <sub>3</sub>	1,02
HBr	0,80	CCl <sub>4</sub>	0
HI	0,42	NH <sub>3</sub>	1,47
BF <sub>3</sub>	0	NF <sub>3</sub>	0,24
CO <sub>2</sub>	0	H <sub>2</sub> O	1,85
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	1,69	CH <sub>3</sub> COCH <sub>3</sub>	2,91
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	1,15	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	0
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OH	1,70	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CH <sub>3</sub>	0,36
(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> CO	4,56	CH <sub>3</sub> COOH	1,74
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> COOH	1,72	CH <sub>3</sub> OH	1,67
CH <sub>3</sub> COOCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	1,78	CH <sub>3</sub> COCl	2,45
HCOOH	1,41	CH <sub>3</sub> SOCH <sub>3</sub>	3,96
HCOH	2,33	CH <sub>3</sub> COH	2,70
OHCH <sub>2</sub> OHCHCH <sub>2</sub> OH	0,96	CH <sub>3</sub> CHOHCH <sub>3</sub>	1,66
COCl <sub>2</sub>	1,17	HOCC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> COOH	0
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N	2,30	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N	1,80
HNO <sub>3</sub>	2,17	SO <sub>2</sub>	1,63

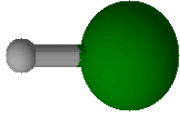
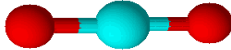
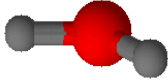
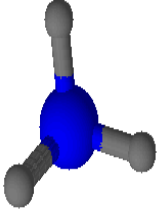
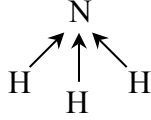
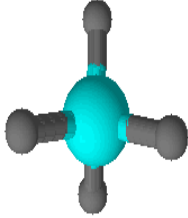
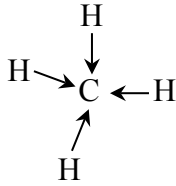
**Tabela 1**– momentos de dipolo de substâncias orgânicas e inorgânicas.

Em geral, para determinar o vetor ( $\mu_r$ ), devemos considerar dois fatores:

✓ A escala de eletronegatividade, que nos permite determinar a orientação dos vetores de cada ligação polar, sendo que os vetores são sempre orientados pelo polo positivo para o negativo.

✓ A geometria da molécula, que nos permite determinar a disposição espacial desses vetores.

A **Tabela 2** mostra alguns exemplos de moléculas cuja geometria espacial, arranjo dos pares de elétrons em torno do átomo central, pode ser um fator determinante para sua polaridade.

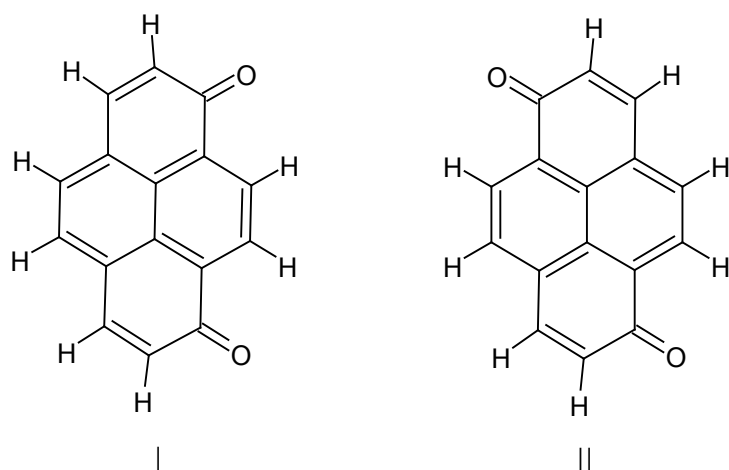
Fórmula Molecular	Representação	Geometria	Vetores	$\vec{\mu}_R$	Molécula
HCl		$\delta^+ \quad \delta^-$ H — Cl	H → Cl		polar
CO <sub>2</sub>		$\delta^- \quad \delta^+ \quad \delta^+ \quad \delta^-$ O = C = O	O ← C → O		apolar
H <sub>2</sub> O		$\delta^- \quad \delta^-$ H — O — H $\delta^+ \quad \delta^+$	H → O ← H		polar
NH <sub>3</sub>		$\delta^- \quad \delta^- \quad \delta^-$ H — N — H $\delta^+ \quad \delta^+ \quad \delta^+$			polar
CH <sub>4</sub>		$\delta^+ \quad \delta^- \quad \delta^- \quad \delta^- \quad \delta^+$ H — C — H $\delta^- \quad \delta^- \quad \delta^+$			apolar

**Tabela 2-** Alguns exemplos de moléculas e sua relação geometria x polaridade\*.

\* Podemos determinar a polaridade de uma molécula utilizando a soma dos vetores momento dipolar ( $\mu_R$ ). Um vetor momento dipolar é uma seta que indica para qual átomo os elétrons de uma ligação estão deslocando-se (eletronegatividade). Quando a soma vetorial é zero, molécula apolar.

## 2.2 SIMETRIA MOLECULAR

A simetria molecular interfere, principalmente, no ponto de fusão (PF), pois moléculas com maior simetria se associam mais fortemente na fase sólida, resultando em compostos com maiores PF. As cetonas aromáticas I e II, representadas na **Figura 21**, evidenciam o efeito da simetria molecular sobre o PF.

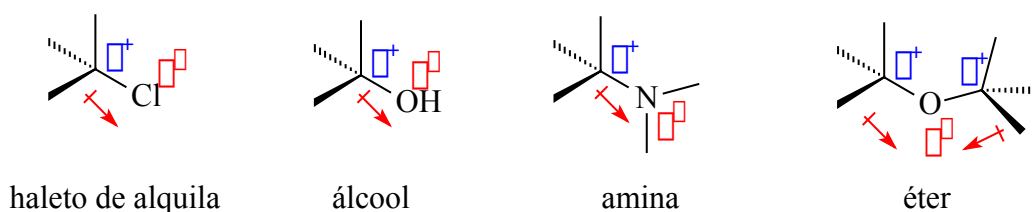


**Figura 21**– Cetonas aromáticas isômeras. (I) pireno-1,8-diona. (II) pireno 1,6-diona.

A cetona pireno-1,8-diona é um sólido cristalino vermelho escuro, de PF=270 °C, e a pireno 1,6-diona possui coloração amarelo ouro, de PF = 309 °C. A molécula II possui uma maior simetria, o que justifica o maior PF.

Outros exemplos, tais como o clorometano ( $\text{CH}_3\text{Cl}$ ) e o metanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ) possuem valores de momento de dipolo próximos ao da água, enquanto espécies como metano ( $\text{CH}_4$ ), etano ( $\text{C}_2\text{H}_6$ ), tetracloreto de carbono ( $\text{CCl}_4$ ) ou benzeno ( $\text{C}_6\text{H}_6$ ) exibem valores iguais a zero. Em razão da simetria das últimas, as polaridades individuais das ligações se cancelam, resultando em moléculas apolares, com momento de dipolo igual a zero.

Além dos haletos de alquila e dos álcoois, espécies tais como éteres, aminas, tióis e sulfetos (**Figura 22**) têm também átomo de carbono ligado a átomo mais eletronegativo: oxigênio, nitrogênio ou enxofre, o que confere polaridade às ligações.



**Figura 22**- Exemplos de moléculas que apresentam ligações covalentes polares e cargas parciais.

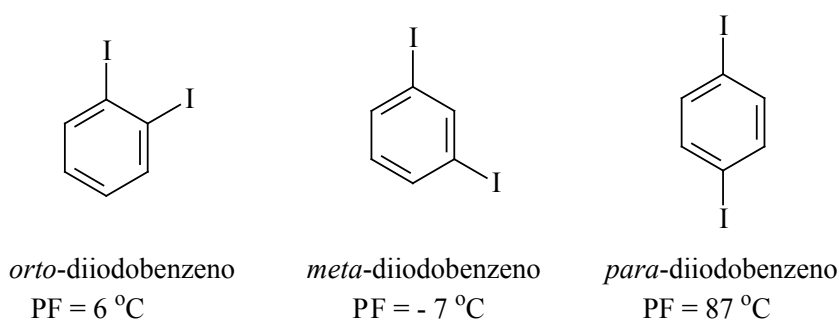


# PROPRIEDADES FÍSICAS

O capítulo trata das propriedades físicas mais cobradas em exames de vestibulares que são ponto de fusão, ponto de ebulição, densidade e solubilidade de compostos orgânicos. O texto aborda os fatores que afetam diretamente essas propriedades, fornecendo elementos para que o leitor possa realizar previsões acerca dessas grandezas físicas.

## 3 | PONTO DE FUSÃO (PF)

O Ponto de Fusão (PF) é a temperatura em que a fase sólida de uma substância pura entra em equilíbrio com a fase líquida em uma dada pressão. Esse equilíbrio se estabelece quando a quantidade de energia requerida para quebrar as forças intermoleculares é exatamente a mesma quantidade de energia cinética das moléculas que se deslocam pela estrutura. Quando comparamos os pontos de fusão e de ebulição entre compostos orgânicos, vemos que três fenômenos afetam estas propriedades: as interações intermoleculares, a polaridade e a massa molecular. O PF é pouco afetado pela pressão externa e depende da natureza da substância, especialmente, da simetria molecular. Substâncias que possuem moléculas mais simétricas possuem maiores PF que seus isômeros funcionais, uma vez que a simetria produz uma estrutura mais compacta na fase sólida, exemplos são mostrados na **Figura 23**.



**Figura 23-** Isômeros de posição do diiodobenzeno.

O isômero mais simétrico é o *para*-diiodobenzeno, por isso apresenta maior PF. Comparando os isômeros *orto* e *meta*, verifica-se que o primeiro é mais simétrico, por isso apresenta maior PF.

Para uma substância pura os processos de fusão ou de solidificação ocorrem

sempre a uma mesma temperatura e esta se mantém constante durante todo o processo, ocorrendo o mesmo para os processos de vaporização e condensação. Diferente do verificado para substâncias puras, na grande maioria das misturas de duas ou mais substâncias as temperaturas de fusão e vaporização não se mantêm constantes ao longo da transformação. Um bom exemplo que retrata bem a influência da composição química sobre a temperatura de fusão é o caso da solidificação de refrigerantes. Nas primeiras fases da solidificação há a formação de gelo (“de água”), havendo notória segregação do xarope que integra o refrigerante - que permanece em forma líquida - contudo agora concentrada - no interior da garrafa. Para tais misturas, as mudanças de estado físico ocorrem em faixas ou intervalos de temperatura, a cada faixa associando-se a segregação de uma de seus componentes.

### 3.1 PONTO DE EBULIÇÃO (PE)

O Ponto de Ebulição consiste na temperatura em que a pressão de vapor de um líquido se iguala à pressão externa. O PE depende da pressão e da natureza da substância, especialmente das forças intermoleculares. O PE de uma substância determinado ao nível do mar (1 atm) é chamado de ponto de ebulição normal.

Composto	PF (°C)	PE (°C)	$\mu$ (D)
cis-1,2-dicloroeteno	-80	+60	1,90
trans-1,2-dicloroeteno	-50	+48	0
cis-1,2-dibromoeteno	-53	+112,5	1,35
trans-1,2-dibromoeteno	-6	+108	0

**Tabela 3** - propriedades físicas de alguns isômeros cis-trans.

As moléculas *cis* são, geralmente, polares (momento dipolo diferente de zero); as *trans* são, em geral apolares (momento dipolo igual a zero). Dessa forma as moléculas *cis* apresentam maior ponto de ebulição, são termodinamicamente menos estáveis. No entanto, as moléculas *trans* são mais compactadas, por causa da sua simetria, conseqüentemente, possuem maiores  $PF_s$ . Por serem mais polarizadas, as moléculas *cis* devem ser mais solúveis (ver **Figura 24**).

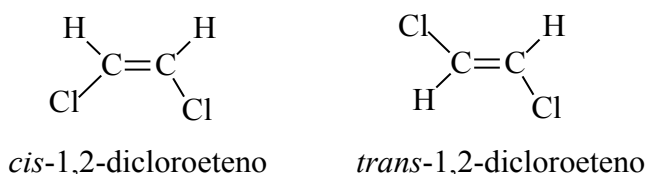


Figura 24- Isômeros geométricos *cis* e *trans*-1,2-dicloroeteno. As moléculas *trans* são em geral mais facilmente “empacotáveis”, apresentando maior PF.

### 3.2 DENSIDADE (d)

A densidade consiste na razão entre a massa de uma substância existente em um dado volume. A densidade da água líquida é de aproximadamente  $1 \text{ g mL}^{-1}$  e, na maioria das vezes, os compostos orgânicos possuem densidades inferiores à da água líquida. Existe uma relação linear entre densidade e PE, uma vez que essas duas propriedades físicas dependem da aproximação das moléculas. Como essa aproximação depende do tamanho e, conseqüentemente, da massa molecular, densidade e PF existem, nos hidrocarbonetos saturados, comportamentos que variam linearmente, como mostrado na **Tabela 4**.

Alcanos	PF (°C)	Densidade (g.L <sup>-1</sup> )	Ciclalcanos	PF (°C)	Densidade (g.L <sup>-1</sup> )
n-pentano	-130	0,626	ciclopentano	-94	0,746
n-hexano	-95	0,659	ciclo-hexano	-6,5	0,779
n-heptano	-90,5	0,684	ciclo-heptano	-12	0,810
n-octano	-57	0,703	ciclo-octano	14	0,830

**Tabela 4.** Propriedades físicas de alguns alcanos.

Os hidrocarbonetos apresentam densidade menor que a da água ( $1 \text{ g/mL}$ ) por dois motivos principais: os átomos que os formam possuem baixos valores de massa atômica ( $\text{C}=12 \text{ u}$  e  $\text{H}=1 \text{ u}$ ) e suas moléculas sendo praticamente apolares, tendem a ficar mais distantes entre si, o que implica menos moléculas por unidade de volume.

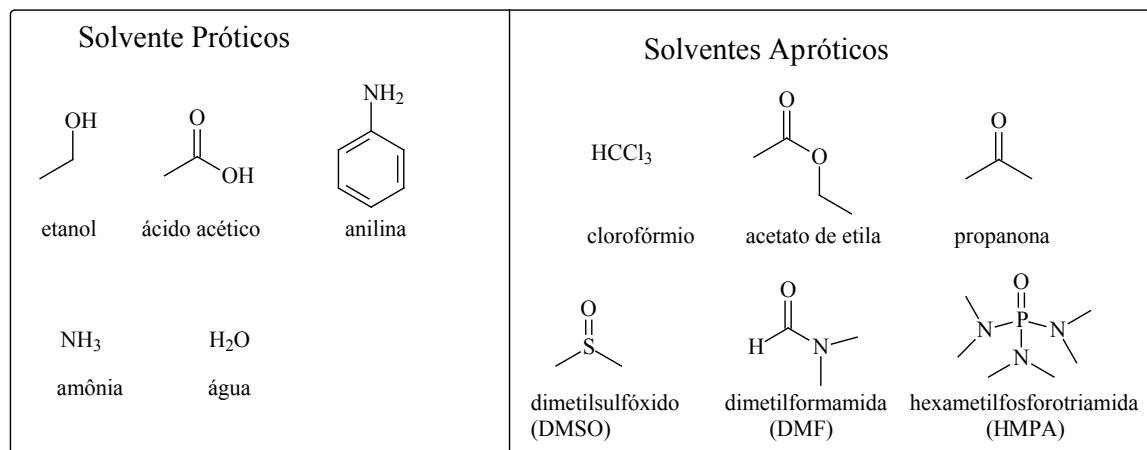
Os poli-haletos orgânicos possuem densidade superior à da água, pois átomos de halogênios (F, Cl, Br e I) possuem massas atômicas bem superiores a C e H. Por exemplo, o clorofórmio ( $\text{CCl}_3\text{H}$ ) possui  $d=1,5 \text{ g mL}^{-1}$  e o  $\text{CH}_2\text{I}_2$  é o líquido mais denso da Química Orgânica com  $d=3,22 \text{ g mL}^{-1}$ .

### 3.3 SOLUBILIDADE (d)

A solubilidade resulta da interação entre as moléculas do soluto e do solvente. A solubilidade é definida como sendo a concentração máxima de soluto dissolvido em uma dada condição de temperatura e pressão. As medidas de solubilidade são realizadas, geralmente, a  $20 \text{ °C}$ . A natureza do solvente afeta a solubilidade dos solutos. Em geral, verifica-se que os solventes polares tendem a dissolver solutos polares e solventes apolares tendem a dissolver solutos apolares.

Essa regra de solubilidade está relacionada com uma grandeza física adimensional chamada de constante dielétrica ( $\epsilon$ ). Quanto maior a constante dielétrica do solvente, maior a capacidade de solvatação de substâncias polares, resultando em uma maior solubilidade desses solutos. Solventes muito polares possuem constantes dielétricas elevadas. O átomo de H fica bastante polarizado quando se liga aos átomos de

elementos químicos mais eletronegativos que são: F, O, N, Cl, Br, I e S, por isso recebe o nome de próton. Dessa forma, água, álcoois, aminas, amidas e ácidos carboxílicos são solventes próticos, enquanto que ésteres, cetonas, haletos orgânicos e ésteres são exemplos de solventes apróticos. A **Figura 25** ilustra alguns desses solventes. A Tabela 5 mostra as constantes dielétricas de alguns solventes a 20 °C e 25 °C.



**Figura 25-** Alguns solventes próticos e apróticos.

Solventes Próticos	$\epsilon$	Solventes Apróticos	$\epsilon$
ácido acético	6,15 (1)	n-pentano	1,84(1)
etilamina	6,17(1)	n-hexano	1,89(1)
anilina	6,89(1)	dioxano	2,21(2)
álcool benzílico	13,1(1)	tetracloroeto de carbono	2,25(1)
n-butanol	17,1(1)	éter dietílico	4,34(1)
isopropanol	18,3(2)	clorofórmio	4,81(1)
n-propanol	20,1(2)	acetato de etila	6,02(2)
etanol	24,25(2)	piridina	12,3(2)
metanol	32,6(2)	acetona	20,7(2)
glicerina	42,5(2)	N,N-dimetilformamida	37,65(1)
água	80,4(1)	acetonitrila	38,1(2)
formamida	105,5(2)	dimetilsulfóxido	45,1(1)

**Tabela 5**– constantes dielétricas ( $\epsilon$ ) de alguns solventes orgânicos próticos e apróticos.

Estes solventes geralmente têm altas constantes dielétricas e altas polaridades. Destaca-se que a constante dielétrica diminui com o aumento da temperatura. Por exemplo, a água possui  $\epsilon = 64$  a 45 °C e  $\epsilon = 70,9$  a 25 °C.

Os solventes polares apróticos como o dimetilsulfóxido (DMSO) e a *N,N*-dimetilformamida (DMF) são utilizados em sínteses orgânicas em que o ânion atua como agente nucleofílico, pois o cátion é fortemente solvatado pelos pares de elétrons

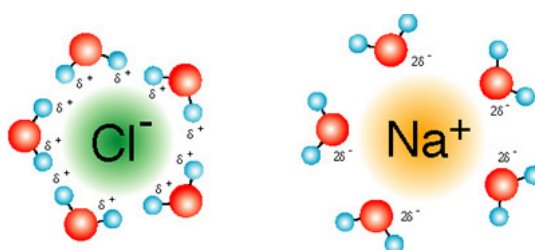
livres do solvente aprótico.

Reações que envolvem a formação de átomos e moléculas carregadas são geralmente endotérmicas na fase gasosa, mas podem se tornar espontâneas em certos solventes. Se os íons são formados a partir de um composto neutro, por exemplo, quando NaCl é dissolvido em água, os cátions e ânions com cargas opostas atraem-se naturalmente uns aos outros, de modo que a formação de uma solução homogênea dispersa pode parecer energeticamente desfavorável, **Figura 26**.

Para conseguir a separação de carga dos íons em solução, duas características do solvente são particularmente importantes:

✓ O primeiro é a estabilização de íons, como consequência da solvatação. Os ânions são melhor solvatados por solventes de ligação de hidrogênio; os cátions são geralmente solvatados por ligação a sítios nucleofílicos de uma molécula de solvente, conforme mostrado na figura acima.

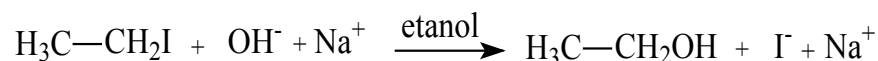
✓ O segundo fator importante é a capacidade das moléculas de solvente de se orientarem entre os íons de modo a atenuar a força eletrostática que um íon exerce sobre o outro. Esta característica é uma função da polaridade do solvente. A polaridade do solvente foi definida e medida de várias maneiras, sendo uma das mais comuns a constante dielétrica  $\epsilon$ . Os solventes de alta constante dielétrica, tais como água ( $\epsilon = 80$ ), dimetilsulfóxido ( $\epsilon = 48$ ) e N,N-dimetilformamida ( $\epsilon = 39$ ), geralmente têm grupos funcionais polares e, frequentemente, altos momentos de dipolo. Quando sujeitos ao campo elétrico de um íon, essas moléculas polares se orientam para se opor ao campo e, ao fazê-lo, limitam seu alcance. Devido à atração eletrostática entre esses grupos polares, os pontos de ebulição desses solventes são geralmente mais altos do que aqueles de solventes não polares de tamanho similar, como éter dietílico ( $\epsilon = 4,3$ ) e hexano ( $\epsilon = 1,9$ ).



**Figura 26-** Processo de solvatação de íons em meio aquoso. Polos positivos da molécula de água se alinham junto ao íon negativo de cloro, enquanto os polos negativos da molécula de água se alinham ao íon positivo de sódio.

Algumas reações de substituição nucleofílica podem ilustrar bem esse fenômeno, como no exemplo da **Figura 27** e **Figura 28**. O cátion é sequestrado pelo solvente, deixando o ânion livre para atuar com reagente nucleofílico nas reações SN (substituição nucleofílica). As substituições nucleofílicas de 2ª ordem, ou bimoleculares (SN<sub>2</sub>), que ocorrem em DMF, apresentam velocidades um milhão de vezes superiores comparadas com aquelas que se processam em etanol. O etanol é um solvente prótico,

logo solvata o cátion e o ânion por igual, diminuindo a reatividade do nucleófilo OH<sup>-</sup>.



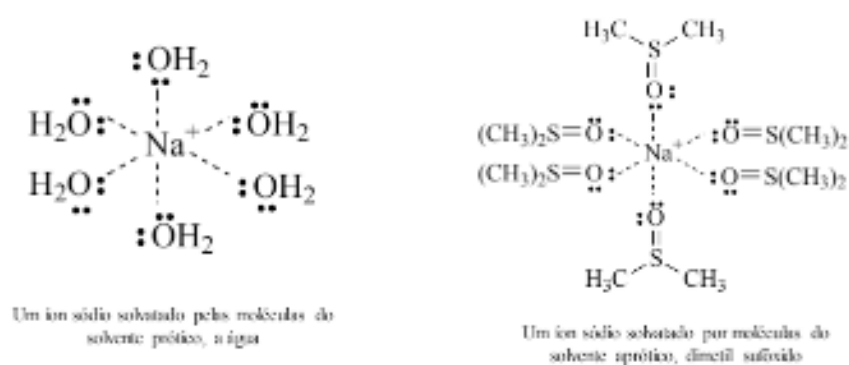
**Figura 27-** Reação SN2 em etanol.

O dimetilsulfóxido (DMSO) é um solvente aprótico, logo solvata apenas o cátion, o que aumenta a reatividade do nucleófilo OH<sup>-</sup>.



**Figura 28-** Reação SN2 em DMSO.

A solvatação envolve a formação de ligações, ligações de hidrogênio e forças de van der Waals. A solvatação de um soluto (por exemplo, NaCl) pela água é chamada de hidratação (**Figura 29**). Espécie química pode interagir fortemente com o solvente, e a força, a natureza dessa interação influenciam muitas propriedades do soluto, incluindo solubilidade, reatividade e cor, além de influenciar as propriedades do solvente, como a viscosidade e a densidade.



**Figura 29-** Esquema de solvatação de cátions Na<sup>+</sup> pelas moléculas de água e DMSO.

# HIDROCARBONETOS

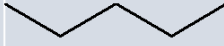
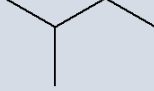

Os hidrocarbonetos constituem a classe mais simples de compostos orgânicos e são amplamente distribuídos na natureza, tendo como principais fontes o petróleo, carvão mineral, xisto betuminoso e inúmeros seres vivos (principalmente, fungos e plantas). Apresentam inúmeras aplicações práticas, pois entram na composição de plásticos, combustíveis, solventes, borrachas e muitos outros materiais. As propriedades físicas dos hidrocarbonetos detêm papel fundamental na determinação de sua utilização como, por exemplo, um lubrificante deve ter alta viscosidade para reduzir o atrito e um combustível deve ser um gás ou um líquido, pois a reação de combustão se processa na fase gasosa.

## 4 | ALCANOS

As moléculas dos alcanos são apolares ou levemente polares, por isso, eles são insolúveis em água e outros solventes polares e bastante solúveis em solventes apolares tais como: benzeno,  $\text{CCl}_4$ , éter de petróleo, clorofórmio, entre outros. Os PE aumentam de 20 a 30 °C por átomo de carbono, a medida que aumenta a cadeia carbônica. Esse aumento ocorre também em outras séries homólogas orgânicas. A elevação no PF não é tão regular, porque as forças intermoleculares nos cristais dependem não só do tamanho das moléculas, como, também, da maneira mais ou menos organizada como elas se agregam produzindo uma estrutura uniforme, **Tabela 6**.

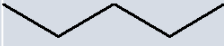
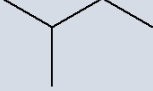

Nome	Fórmula	PF (°C)	PE (°C)
metano	$\text{CH}_4$	-183	-162
etano	$\text{C}_2\text{H}_6$	-172	-88,5
propano	$\text{C}_3\text{H}_8$	-187	-42
butano	$\text{C}_4\text{H}_{10}$	-138	0
pentano	$\text{C}_5\text{H}_{12}$	-130	36

**Tabela 6-** PF e PE dos alcanos normais de 1 a 5 átomos de carbono.

			
	<i>n</i> -pentano	isopentano	neopentano
PE (20 ou 25°C e 1 atm)	36 °C	28 °C	9,5 °C

Observando a

**Figura 30**, verifica-se que o PE é reduzido quando são adicionadas ramificações, pois elas fazem com que a molécula se aproxime da forma esférica, diminuindo a área superficial e, conseqüentemente, diminuindo as forças intermoleculares.

			
	<i>n</i> -pentano	isopentano	neopentano
PE (20 ou 25°C e 1 atm)	36 °C	28 °C	9,5 °C

**Figura 30-** Efeito do aumento do número de ramificações nos PE de alcanos isômeros.

A **Tabela 7** mostra o estado de agregação dos alcanos normais a 25 °C e 1atm:

Estados de Agregação	Número de C por molécula
Gasoso	3 a 4
Líquido	5 a 17
Sólido	Demais

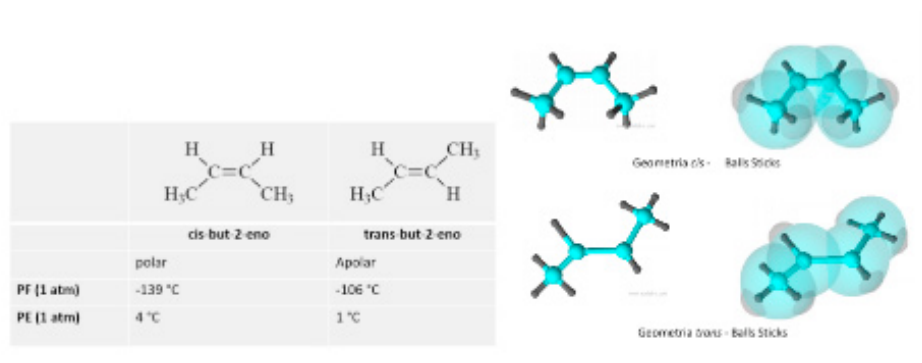
**Tabela 7-** Fases de agregação dos alcanos a 25 °C e 1 ATM.

A densidade dos alcanos aumenta, inicialmente, com a massa molecular, mas tende depois para um limite de 0,8 g mL<sup>-1</sup>, isto é, são menos densos que a água. Os compostos orgânicos são, na maioria das vezes, menos densos que a água, porque são constituídos, especialmente, por C e H e também pelo fato de as forças intermoleculares serem, em geral, de baixa intensidade. Com isso, as moléculas ficam mais distantes entre si e a densidade torna-se baixa. De modo geral, para serem mais densos que a água, as substâncias orgânicas devem possuir um átomo pesado como o I ou o Br, ou vários, como Cl. O metano (CH<sub>4</sub>) é o hidrocarboneto mais simples e é o constituinte mais abundante do gás natural.



## 4.1 ALCENOS

Os alcenos são insolúveis em água e menos densos que ela, são solúveis em solventes orgânicos e no SO<sub>2</sub> líquido, por isso, esse solvente separa alcenos de alcanos, na indústria petroquímica, uma vez que os alcanos são insolúveis em SO<sub>2</sub>. Os PE dos alcenos são muito próximos aos dos alcanos correspondentes. Comparando diastereoisômeros geométricos, verifica-se que o isômero *trans* é mais simétrico e apolar, por isso, apresenta maior PF (o PF depende bastante da simetria molecular) e menor PE (o PE depende muito da polaridade), conforme mostra **Figura 31**. A **Tabela 8** mostra o estado de agregação dos alcenos a 25 °C e 1atm.



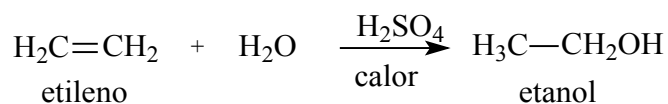
**Figura 31-** PF e PE, Geometria do cis- e trans-buteno, em projeções Balls Sticks (bola e vara), mostrando nuvens eletrônicas dos substituintes ligados a ligação dupla, que pode resultar num maior ou menor impedimento estérico (software ASC/3D Viewer - Freeware).

O *trans* é mais estável, pois não há repulsão entre os grupos metilas (mais volumosos) e tem um momento dipolar nulo, o que dá maior condição de estabilidade a sua estrutura, como também a simetria é maior no isômero *trans*.

Estados de Agregação	Número de C por molécula
Gasoso	2 a 4
Líquido	5 a 15
Sólido	Demais

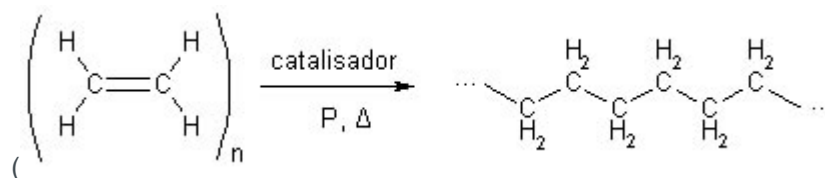
**Tabela 8-** Fases de agregação de alcenos a 25 °C e 1 ATM.

O etileno (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>) é o alceno mais importante, pois é a substância orgânica mais consumida na indústria e é o principal hormônio de amadurecimento das frutas. A hidratação do etileno, conforme Figura 32, é um dos principais métodos de obtenção de etanol fora do Brasil

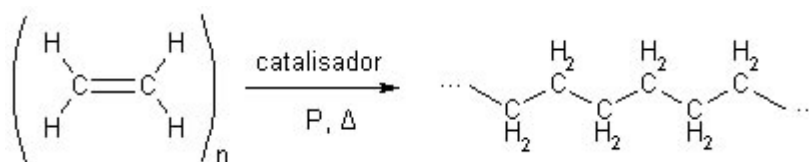


**Figura 32**– Reação de hidratação do etileno.

Outra aplicação importante desse alceno é que ele dá origem a um polímero muito usado em nosso cotidiano o polietileno



**Figura 33):**



**Figura 33-** Polimerização do eteno em polietileno.

Esse polímero é muito usado porque, além de ser de baixo custo, ele tem alta resistência à umidade, ao ataque de substâncias químicas, como solventes em geral, e também é versátil, pois se o polímero formado for de cadeia reta, temos um polímero de alta densidade (PEAD ou HDPE), que é mais rígido e usado na produção de garrafas, brinquedos e outros objetos.

Por outro lado, o polietileno de cadeia ramificada é de baixa densidade (PEBD ou LDPE), sendo usado na produção de sacolas, revestimentos de fios, cabos, tubos, embalagens de produtos farmacêuticos, películas plásticas e folhas de embalagens de alimentos

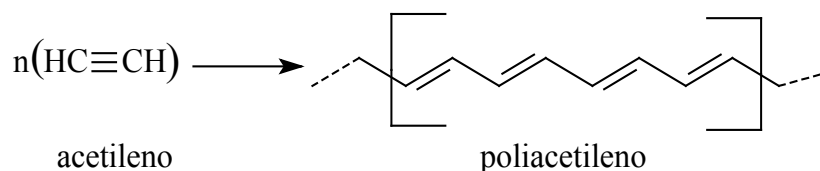
## 4.2 ALCINOS

São insolúveis em água e menos densos que ela. São bastante solúveis em solventes orgânicos (éteres, benzeno,  $\text{CCl}_4$ ,  $\text{CS}_2$ , entre outros). Os alcinos podem ser encontrados nas fases sólida, líquida ou gasosa dependendo da massa molecular (**Tabela 9**).

Estados de Agregação	Número de C por molécula
Gasoso	2 a 4
Líquido	5 a 15
Sólido	demais

**Tabela 9**– Fases de agregação de alcinos a 25 °C e 1 ATM.

O acetileno (C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>), **Figura 34**, é o alcino mais importante. Apresenta inúmeras aplicações práticas e é o gás de maçaricos que cortam chapas metálicas, pois a queima do acetileno atinge temperaturas próximas de 3000 °C. O amadurecimento forçado de bananas se deve à hidrólise do carbureto (CaC<sub>2</sub>) que é colocado em contato com a fruta. Essa hidrólise produz acetileno que amadurece as bananas. Outra importante aplicação do acetileno é na produção de polímero, condutor de eletricidade, chamado de poliacetileno.



**Figura 34**– Reação de polimerização acíclica do acetileno.

Os alcinos têm pontos de ebulição mais altos do que os alcanos ou alcenos, porque o campo elétrico de um alcino é mais facilmente distorcido, produzindo forças atrativas mais fortes entre as moléculas, **Tabela 10**.

Nome do composto	Formula	Ponto de ebulição (°C)
eteno /etileno	CH <sub>2</sub> =CH <sub>2</sub>	-103.7
acetileno	HC≡CH	-84.0
propeno	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>3</sub>	-47.6
propino	HC≡CCH <sub>3</sub>	-23.2
but-1-eno	CH <sub>2</sub> =CHCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	-6.1
cis-but-2-eno	cis-CH <sub>3</sub> CH=CHCH <sub>3</sub>	+3.7
trans-but-2-eno	trans-CH <sub>3</sub> CH=CHCH <sub>3</sub>	+0.9

metilprop-2-eno	$\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)_2$	-6.6
but-1-ino	$\text{HC}=\text{CCH}_2\text{CH}_3$	+8.1
but-2-ino	$\text{CH}_3\text{C}=\text{CCH}_3$	+27.0
pent-1-eno	$\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	+30.2
pent-1-ino	$\text{HC}=\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$	+40.2

**Tabela 10-** Comparação entre pontos de ebulição de alcinos e alcenos.

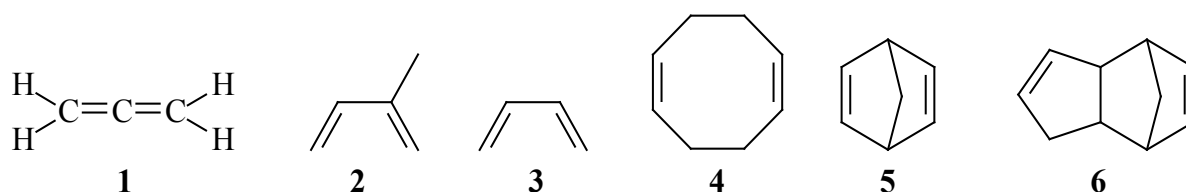
### 4.3 ALCADIENOS OU DIENOS

Em química orgânica, um dieno ou alcadieno é um hidrocarboneto que contém duas ligações duplas. Podem ser divididos em três classes, dependendo da localização relativa das ligações duplas:

✓ Os dienos acumulados têm as ligações duplas compartilhando um átomo comum como em um grupo de compostos chamados alenos.

✓ Os dienos conjugados possuem ligações duplas conjugadas separadas por uma ligação simples.

✓ Os dienos não conjugados (isolados) têm as ligações duplas separadas por duas ou mais ligações simples. Eles são geralmente menos estáveis que os dienos conjugados isoméricos. Isso também pode ser conhecido como um dieno isolado.



**Figura 35-** Exemplos de dienos, 1,2- propadieno (1), 2-metil-1,3-butadieno (2), 1,3-butadieno (3), 1,5-ciclo-octadieno (4), nornornadieno (5), dicitopentadieno (6).

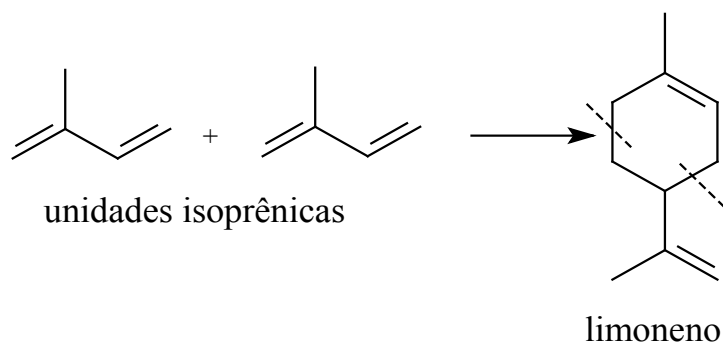
Os alcadienos são insolúveis em água e menos densos que ela. São bastante solúveis em solventes orgânicos (éteres, benzeno,  $\text{CCl}_4$ ,  $\text{CS}_2$ , entre outros). A **Tabela 11** mostra o estado de agregação dos alcanodienos, a 25 °C e 1 atm.

Estados de Agregação	Número de C por molécula
Gasoso	3 a 4
Líquido	5 a 10
Sólido	Acima de 10

**Tabela 11–** Fases de agregação de alcadienos a 25 °C e 1 ATM.

O principal representante dessa classe de hidrocarbonetos é o isopreno ( $\text{C}_5\text{H}_8$ ),

que produz uma infinidade de substâncias denominadas de terpenos. Os terpenos são polímeros de isopreno como, por exemplo, o limoneno, que é constituído de unidades isoprênicas como mostrado na **Figura 36**:

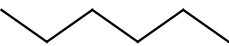


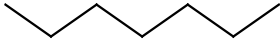
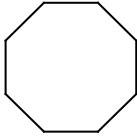
**Figura 36-** Reação de dimerização do isopreno.

O limoneno (*4R*-1-metil-4-isopropenil-ciclo-hex-1-eno  $C_{10}H_{16}$ , composto orgânico que pertence à família dos terpenos, é um líquido incolor, com um aroma cítrico, um ponto de fusão de  $-74,35^{\circ}C$ , um ponto de ebulição de  $170-180^{\circ}C$  e uma densidade de  $0,85 \text{ g mL}^{-1}$ .

#### 4.4 CICLOALCANOS

Cicloalcanos são tipos de hidrocarboneto que possuem um ou mais anéis de átomos de carbono em sua estrutura. As propriedades físicas dos cicloalcanos são semelhantes às dos alcanos, mas possuem pontos de ebulição mais altos, pontos de fusão e densidades mais altas devido ao seu maior número de forças de London, produzem estruturas mais compactas, conforme mostrado na **Tabela 12**. Geralmente, o ponto de fusão, o ponto de ebulição e a densidade dos cicloalcanos aumentam à medida que o número de átomos carbonos aumenta na cadeia.

Composto	Ponto de Fusão ( $25^{\circ}C$ e 1 ATM)	Ponto de Ebulição ( $25^{\circ}C$ e 1 ATM)	Densidade (a $25^{\circ}C$ )
 n-alcano	$-95^{\circ}C$	$69^{\circ}C$	0,659

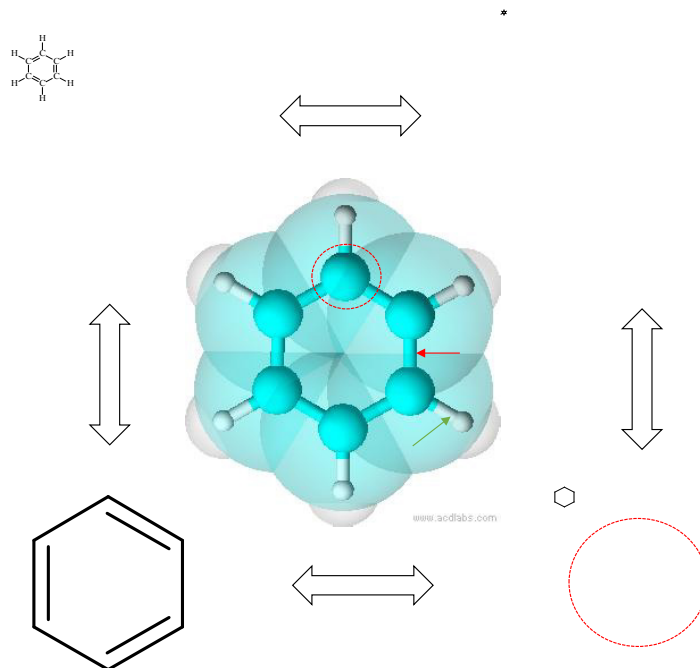
	6,5 °C	81 °C	0,779
ciclohexano			
	-91 °C	98 °C	0,684
n-heptano			
	-12 °C	118 °C	0,810
cicloheptano			
	-57 °C	126 °C	0,739
n-octano			
	14 °C	149 °C	0,830
ciclo-octano			

**Tabela 12** - Algumas propriedades físicas de alcanos e ciclanos.

Os cicloalcanos são também não polares e não possuem ligações de hidrogénio intermoleculares; eles geralmente são hidrofóbicos (o que significa que não se dissolvem na água) e são menos densos que a água. Cicloalcanos também podem ser usados para muitos propósitos diferentes. Estes usos são tipicamente classificados pelo número de carbonos no anel cicloalcano. Muitos cicloalcanos são utilizados em combustíveis para motores, gás natural, gás de petróleo, querosene, diesel e muitos outros óleos pesados.

#### 4.5 COMPOSTOS AROMÁTICOS BENZENOIDES


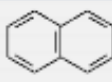
Os compostos aromáticos, originalmente denominados devido às suas propriedades aromáticas, são estruturas de anéis de hidrocarbonetos insaturados que exibem propriedades especiais, incluindo uma estabilidade incomum, devido à sua aromaticidade. Eles são frequentemente representados como estruturas de ressonância contendo ligações simples e duplas. No entanto, a ligação é mais forte do que o esperado para uma estrutura conjugada, e é mais precisamente representada como densidade eletrônica deslocalizada entre todos os átomos do anel. A **Figura 37** a seguir mostra algumas maneiras diferentes de desenhar a estrutura no benzeno, composto aromático mais simples.



**Figura 37-** Algumas representações do benzeno.



A Difração de raios-X mostra que todas as seis ligações de C-C no benzeno são do mesmo comprimento (140 pm). Os comprimentos de ligação C-C são maiores que uma ligação dupla (135 pm), mas mais curtos do que uma ligação simples (147 pm). Essa distância intermediária é consistente com a deslocalização de elétrons: os elétrons para a ligação C – C são distribuídos igualmente entre cada um dos seis átomos de carbono. A molécula é planar.

Compostos aromáticos benzenoides são tóxicos, insolúveis em água, muito solúveis em solventes orgânicos e, a 25 °C, encontram-se na fase sólida ou líquida, dependendo da massa molecular. Possuem maiores densidades que os ciclanos correspondentes, porque os anéis aromáticos são planos, determinando uma maior compactação das moléculas, uma interação intermolecular mais forte **Figura 38**.

Propriedade	 Benzeno	 Naftaleno
PF (1 atm)	5,5 °C	80 °C
PE (1 atm)	80 °C	218°C
Densidade (a 25 °C em g mL <sup>-1</sup> )	0,879	1,160

**Figura 38-** Algumas propriedades físicas de benzeno e naftaleno.

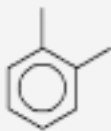

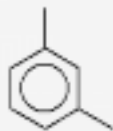
A substituição de um átomo de H no benzeno, por um grupo metil, produz o tolueno, que possui maior PE porque apresenta maior massa molecular. A inserção da metila diminui a simetria molecular, por isso o PF do tolueno é bem menor que o do benzeno, **Figura 39**.

Propriedade		
	Benzeno	Tolueno
PF (1 atm)	5,5 °C	-80 °C
PE (1 atm)	80 °C	111 °C
Densidade (a 25 °C em g mL <sup>-3</sup> )	0,879	0,866

**Figura 39**– Algumas propriedades físicas do benzeno e do tolueno.

Nos benzenos dissustituídos e isômeros existe uma relação geral que diz:

“O isômero *para* possui PF maior que os isômeros *orto* e *meta*”. Essa regra é facilmente compreendida, pois o isômero *para* é o mais simétrico. O isômero *orto* possui o maior PE, porque é o mais polar. O isômero *para* apresenta o menor PE porque é apolar, **Figura 40**.

Propriedade			
	orto-xileno	meta-xileno	para-xileno
PF (1 atm)	-25 °C	-48 °C	13 °C
PE (1 atm)	144 °C	139 °C	138 °C
Densidade (a 25 °C em g mL <sup>-3</sup> )	0,880	0,864	0,861

vv

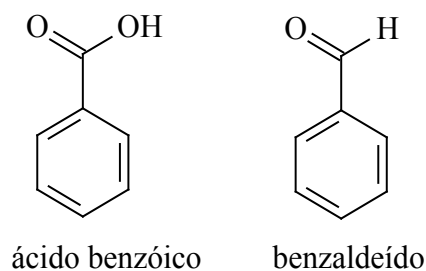
**Figura 40**- PF, PE e densidades de xilenos.

O benzeno apresenta a capacidade de causar anemia e leucemia, por isso ele não é mais utilizado como solvente industrial e laboratorial. Um fato curioso ocorre quando um átomo de H do benzeno é substituído por uma carboxila (COOH), produzindo o ácido benzoico (**Figura 41**), que é amplamente utilizado como conservante de alimentos.

O ácido benzoico é um sólido incolor, de PF = 122 °C. O benzaldeído (**Figura 41**), um líquido de odor agradável e constituinte do óleo essencial de diversas flores,



resulta da substituição de um átomo de H do benzeno por um grupo formil (CHO). O benzaldeído possui PE = 178 °C a 1 atm.



**Figura 41-** Estruturas moleculares do ácido benzoico (AB) e do benzaldeído.

O AB é um composto fungistático amplamente utilizado como conservante de alimentos. É um líquido incolor com um odor característico de amêndoa. O benzaldeído, principal componente do óleo de amêndoa amarga, pode ser extraído de várias outras fontes naturais

# FUNÇÕES OXIGENADAS

As funções oxigenadas consistem em diversas classes de compostos orgânicos, dentre as quais os álcoois, ácidos carboxílicos, ésteres, aldeídos e cetonas são os mais importantes. As sínteses orgânicas utilizam os haletos como reagentes (material de partida), porém esses compostos são caros e praticamente não ocorrem na natureza. Essa dificuldade é contornada pelo emprego de álcoois como matérias-primas para obtenção de haletos, pois os álcoois são bem mais acessíveis e viáveis economicamente. Os lipídios simples (óleos, gorduras e ceras) são ésteres de ácidos graxos que são ácidos carboxílicos derivados do ácido acético. Os agentes flavorizantes mais conhecidos são ésteres voláteis que constituem as essências ou de inúmeros frutos e flores.

As outras funções oxigenadas como éteres, fenóis, anidridos e haletos de ácidos apresentam também diversas aplicações práticas tais como solventes, desinfetantes e reagentes químicos.

## 5 | ÁLCOOIS

Os álcoois mais simples (até 3 átomos de carbono) conseguem estabelecer ligações de hidrogênio com a água, por isso, eles são completamente solúveis nesse solvente. À medida que a cadeia carbônica aumenta, a parte apolar ou hidrofóbica também cresce, fazendo com que a solubilidade em água diminua e aumente em solventes orgânicos.

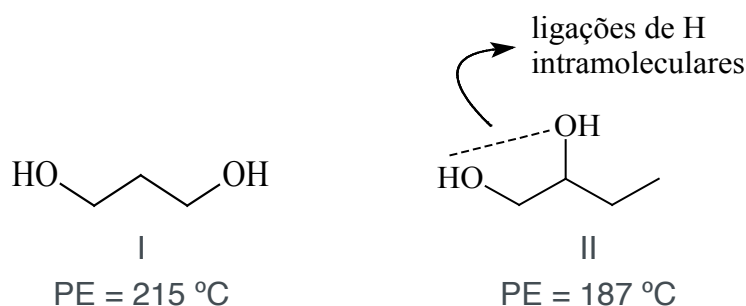
As solubilidades dos álcoois I e II são, respectivamente, 7,9 e 2,3 g em 100 g de água a 20°C, **Figura 42**.



**Figura 42**– Moléculas de n-butanol (I) e n-pentanol (II).

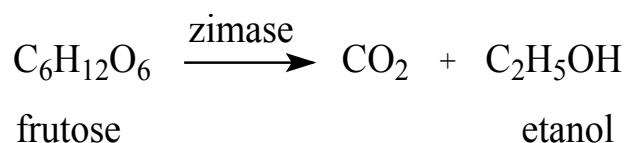
A 25 °C e 1 atm só existem álcoois líquidos ou sólidos, pois eles conseguem se associar por ligações de hidrogênio. Os álcoois possuem maiores PE que os hidrocarbonetos, éteres, aminas, aldeídos e cetonas de massa molar similar, devido a uma maior interação intermolecular. Comparando isômeros de poliálcoois, verifica-se que o PE é maior no isômero que não forma LHs intramoleculares, pois esse tipo de

associação diminui o número de ligações de H intermoleculares que são responsáveis pela magnitude do PE, na **Figura 43** observa-se que o isômero II estabelece ligações de H intramoleculares, por isso, seu PE é menor.



**Figura 43**– Diálcoois isômeros onde em (II) ocorre ligações de H intramoleculares.

Os álcoois metanol e etanol podem formar misturas azeotrópicas com benzeno. O etanol é o principal álcool, sendo empregado em bebidas, como combustível, solvente e reagente químico. O Brasil é um dos países que mais produzem etanol por meio da biomassa. O processo utiliza a fermentação de açúcares provenientes do caldo de cana de açúcar. A zimase, enzima produzida por leveduras da espécie *Saccharomyces cerevisiae*, catalisa essa reação bioquímica mostrada na **Figura 44**.

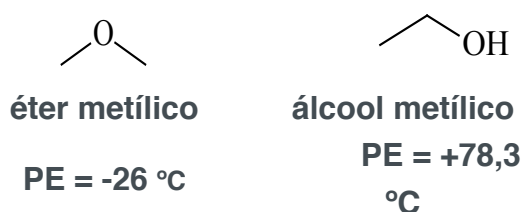


**Figura 44**– Reação simplificada da fermentação enzimática da frutose.

## 5.1 ÉTERES

Os éteres são mais voláteis que os álcoois correspondentes, porque suas moléculas não se associam por ligações de H.

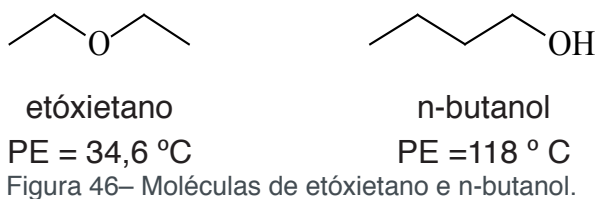
Os isômeros éter metílico e álcool etílico apresentam PE separados em mais de 100 °C, evidenciando as fortes associações entre as moléculas de álcool, o que não ocorrem nas de éter, como demonstra a **Figura 45**.



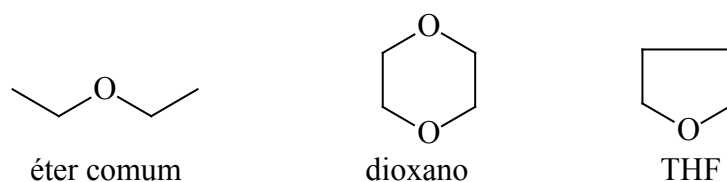
**Figura 45** – Moléculas de éter metílico e álcool etílico.

A solubilidade em água é semelhante à dos álcoois, porque os éteres mais

simples podem estabelecer ligações de H com a água. Os compostos representados na **Figura 46** possuem a solubilidade de 8 g/100 g de água a 20 °C.



Os éteres são os solventes orgânicos mais empregados na atualidade, pois são pouco reativos, dissolvem a grande maioria dos compostos orgânicos e são voláteis. Os compostos na **Figura 47**, são empregados como solventes de laboratório. THF é a sigla de tetra-hidrofurano.



**Figura 47**– Estruturas de três éteres bastante empregados como solventes em laboratório.

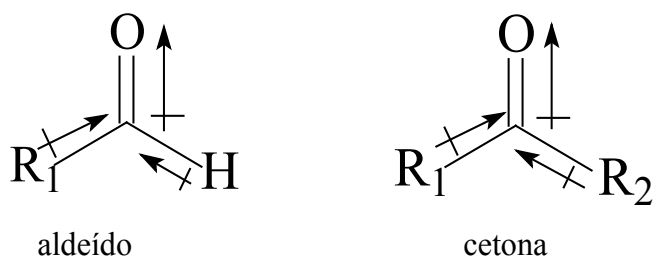
## 5.2 ALDEÍDOS E CETONAS

Aldeídos e cetonas são estruturalmente semelhantes, ambos apresentam o grupo funcional carbonila (C=O). As diferenças entre eles é que os primeiros possuem um átomo de hidrogênio e um grupo alquil ou aril ligado ao carbono carbonílico, ao passo que os dois últimos possuem dois grupos alquil ou aril.

A ligação dupla C=O é polar, e por isso encontram-se associado por meio de interações intermoleculares dipolo-dipolo, e por isso apresentam PE mais alto do que os alcanos correspondentes.

Com o aumento da cadeia carbônica desses compostos, a influência do grupo carbonila sobre suas propriedades físicas diminui, e podem apresentar PE semelhantes aos alcanos correspondentes, de massa molar semelhante. Por exemplo, o dodecan-2-ona (MM = 184 g/mol, PE = 247 °C) e tridecano (MM = 184 g/mol, PE = 235 °C).

O formaldeído e o acetaldeído são gases a 25 °C e 1 atm. Os aldeídos e cetonas mais simples são solúveis em água e à medida que a cadeia cresce aumenta a solubilidade em solventes orgânicos e diminui em água. As cetonas são mais polares que os aldeídos, por isso elas apresentam maiores PE. Nos aldeídos, o vetor momento dipolar resultante é menor devido ao pequeno vetor da ligação C-H, **Figura 48**.

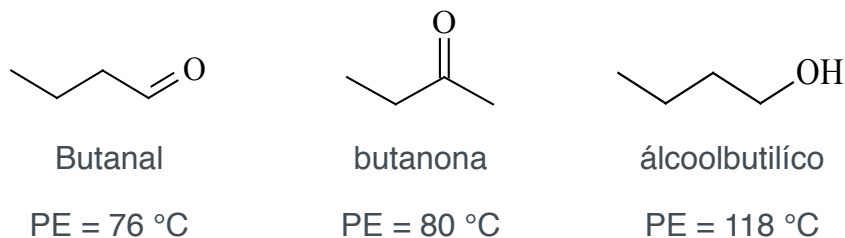


**Figura 48**– Vetores momento de dipolo em aldeídos e cetonas.  
Os isômeros acetona e propanal,



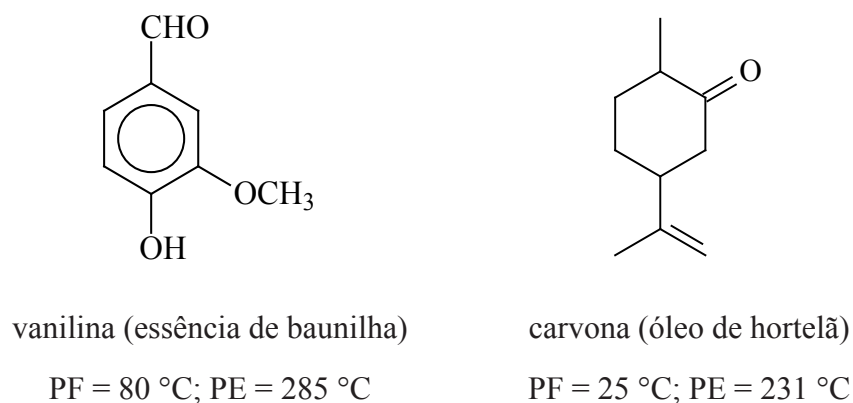
**Figura 49** – PE dos isômeros propanal e acetona.

Aldeídos e cetonas são mais voláteis que os álcoois correspondentes, porque os compostos carbonilados (aldeídos e cetonas) não se associam por LHs, **Figura 50**.



**Figura 50** – PE de butanal, butanona e álcool butílico.

Aldeídos e cetonas de massas moleculares elevadas apresentam aromas agradáveis sendo empregados nas indústrias de perfumaria, **Figura 51**.



**Figura 51** – PF e PE de vanilina e carvona.

### 5.3 FENÓIS

Os fenóis constituem um dos maiores grupo de metabólitos secundários de plantas, variando em tamanho, desde uma estrutura simples com anel aromático até estruturas complexas, como ligninas. Embora muitos dos óleos essenciais sejam terpenos, alguns são compostos fenólicos, por exemplo timol de *Thymus spp.* (tomilho). Muitos fenóis simples são responsáveis pelo sabor, por exemplo, o eugenol no cravo, Figura 52.

Os fenóis são sólidos em condições ambientes, com exceção do m-cresol, que é líquido. Eles são incolores e pouco solúveis ou insolúveis em água, mas são solúveis em bases. O grupo hidroxila no fenol é responsável pela formação de ligações de hidrogênio intermoleculares. Assim, formam-se ligações de hidrogênio entre moléculas de água e fenol que tornam o fenol solúvel em água.

As solubilidades, a 20 °C do fenol comum e do catecol são, respectivamente, 9,3 g e 14 g em 100 g de água. A 25 °C e 1 atm somente o m-cresol é líquido. Os demais são sólidos ou líquidos. O maior PF da hidroquinona pode ser explicado pela maior simetria molecular e o menor PE do catecol é justificado pela

Formação de ligações de H intramoleculares.

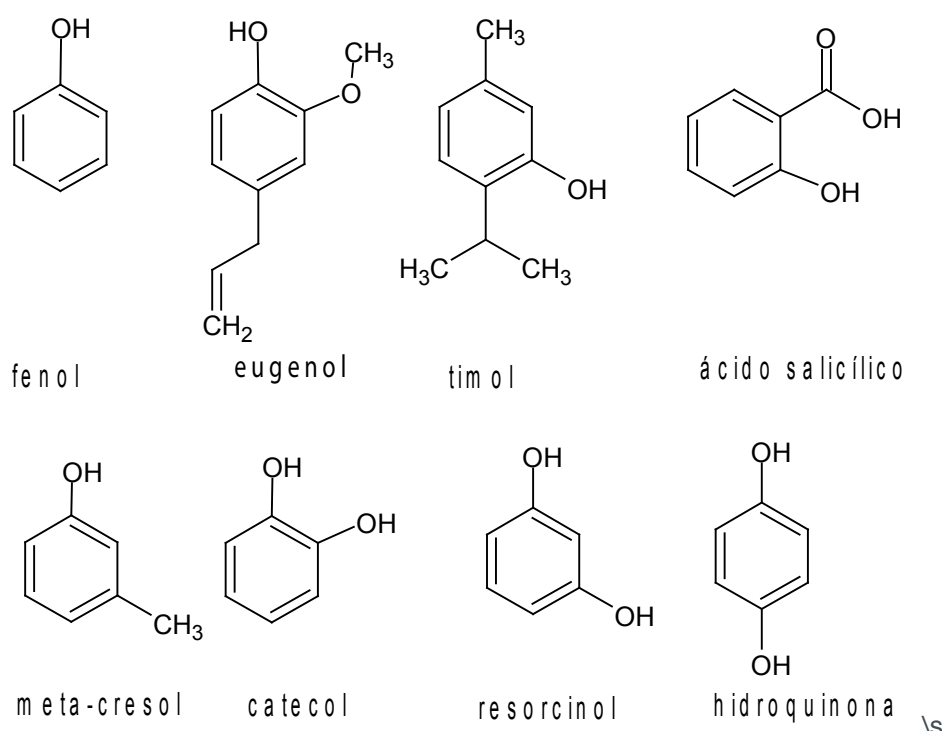
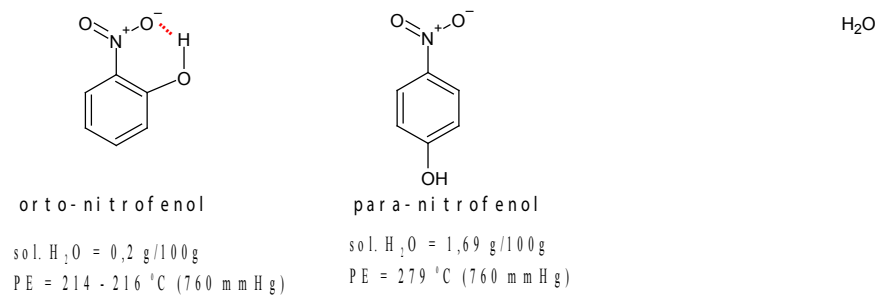


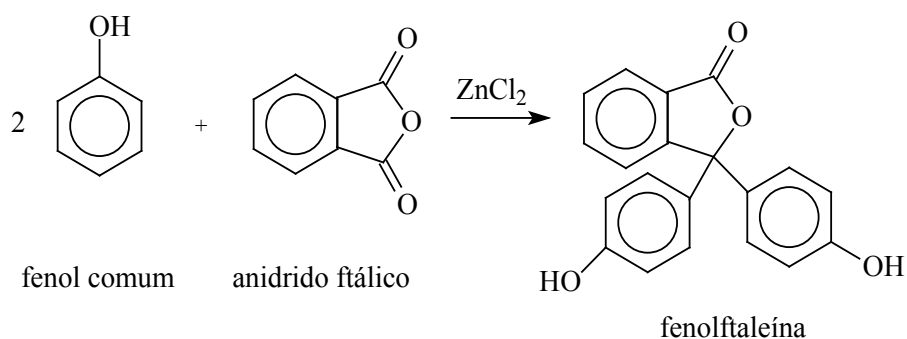
Figura 52- Estruturas de fenóis simples.

Em alguns fenóis *orto*-substituídos (como por exemplo, com o grupo nitro) é possível ocorrer a formação de ligação de hidrogênio intramolecular, o que pode dificultar o processo de solubilização em água uma vez que reduz a possibilidade de formação de LH intermolecular do tipo água-fenol. Por outro lado, a LH intramolecular contribui para o aumento da volatilidade do isômero *orto*, que possui PE menor que o isômero para, Figura 53.



**Figura 53-** Representação da ligação de hidrogênio (LH) intramolecular em fenóis.

Os fenóis apresentam várias aplicações práticas, na produção de baquelite, desinfetantes, germicidas, reveladores fotográficos e indicadores ácido-base. A fenolftaleína (**Figura 54**) é um dos indicadores ácido-base mais conhecidos e sua reação de obtenção emprega o fenol comum como reagente.



**Figura 54-** Reação de síntese da fenolftaleína.

## 5.4 ÁCIDOS CARBOXÍLICOS

Ácidos carboxílicos são amplamente encontrados na natureza, frequentemente combinados com outros grupos funcionais. Ácidos alquil-carboxílicos simples, compostos por quatro a dez átomos de carbono, são líquidos ou sólidos de baixo ponto de fusão, tendo odores muito desagradáveis. Os ácidos graxos são componentes importantes das biomoléculas conhecidas como lipídios, especialmente gorduras e óleos. Como mostrado na **Tabela 13**, esses ácidos carboxílicos de cadeia longa são geralmente referidos por seus nomes comuns, que na maioria dos casos refletem suas fontes.

Ácidos graxos saturados		
Fórmula	Nome comum	Ponto de ebulição
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{10}\text{CO}_2\text{H}$	ácido láurico	45 °C
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{12}\text{CO}_2\text{H}$	ácido mirístico	55 °C
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{14}\text{CO}_2\text{H}$	ácido palmítico	63 °C
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{16}\text{CO}_2\text{H}$	ácido esteárico	69 °C
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{18}\text{CO}_2\text{H}$	ácido araquídico	76 °C
Ácido graxos insaturados		
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_5\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7\text{CO}_2\text{H}$	ácido palmitoleico	0 °C
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7\text{CO}_2\text{H}$	ácido oleico	13 °C
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7\text{CO}_2\text{H}$	ácido linoleico	-5 °C
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7\text{CO}_2\text{H}$	ácido linolênico	-11 °C
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4(\text{CH}=\text{CHCH}_2)_4(\text{CH}_2)_2\text{CO}_2\text{H}$	ácido araquidônico	-49 °C

Tabela 13- Ácidos graxos naturais de saturados e insaturados C10 a C20\*.

\*Como a natureza produz esses ácidos de cadeia longa ao unir as unidades de acetato, não é de surpreender que os átomos de carbono que compõem os produtos naturais sejam múltiplos de dois. Nestes exemplos todos os ácidos graxos insaturado apresentam geometria *cis*.

Os seguintes (**Figura 55**) compostos são exemplos de outros ácidos carboxílicos que ocorrem naturalmente. As estruturas moleculares variam de simples a complexas, muitas vezes incorporam uma variedade de outros grupos funcionais, e muitos são quirais (pode apresentar um ou mais carbonos de hibridização  $sp^3$  que está ligado a quatro átomos ou grupos diferentes).

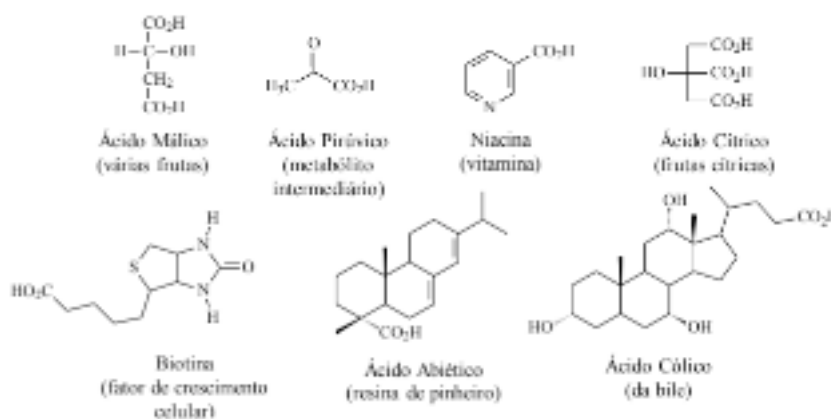
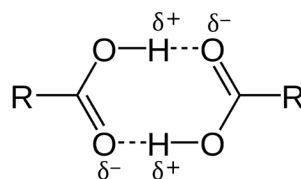


Figura 55- Exemplos de ácidos carboxílicos de ocorrência natural.

Considerando a série dos monoácidos acíclicos e saturados, verifica-se que os três primeiros (ácidos fórmico, acético e propiônico) são líquidos incolores, de cheiro irritante e totalmente miscíveis com a água. Os ácidos seguintes são, ainda, líquidos incolores, oleosos, de cheiro desagradável (semelhante a manteiga rançosa) e cuja solubilidade em água diminui com o aumento da cadeia carbônica. Do ácido decanoico em diante, são sólidos brancos, semelhantes à cera, inodoros e insolúveis em água. Os PE dos ácidos são bem mais elevados que o dos álcoois correspondentes, devido



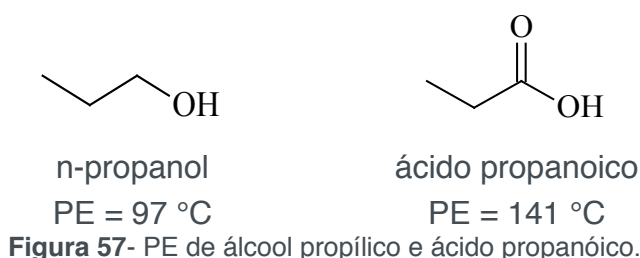
às ligações de H que produzem dímeros, isto é, associação de duas moléculas, **Figura 56**:



**Figura 56**– Formação de dímero de ácidos carboxílicos.

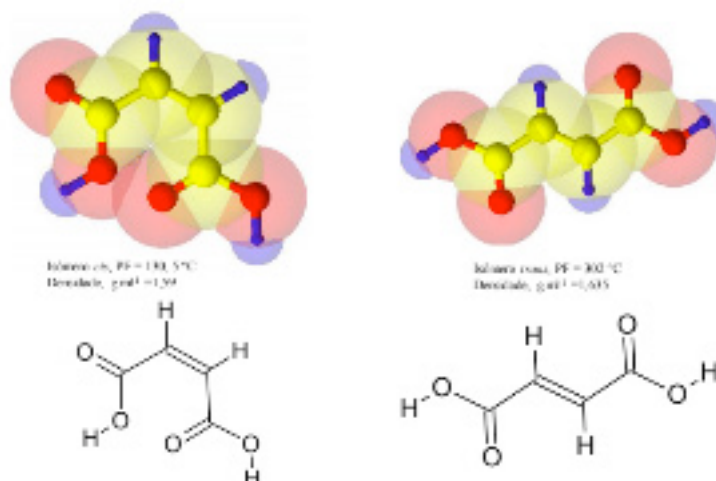
Em química, um dímero (composto por duas partes) é uma molécula composta por duas unidades similares ou monômero unidos. É um caso especial de polímero. Há formação de ligações de hidrogênio entre os pares de elétrons livre do átomo de oxigênio como cargas parciais negativas e o átomo de hidrogênio com cargas parciais positiva.

O álcool *n*-propanol apresenta um PE bem inferior ao do ácido propanoico (**Figura 57**) devido ao fato do ácido propanoico apresentar mais associações moleculares por ligações de H.



O ácido acético, quando puro, congela a 16,7 °C produzindo cristais semelhantes ao gelo, daí o nome ácido acético glacial. Os diastereoisômeros geométricos, ácido maleico (*cis*) e fumárico (*trans*), **Figura 58**, diferem quanto à formação de anidrido. A reação consiste no aquecimento na presença de  $P_2O_5$ , que é um agente desidratante. Apenas o ácido maleico produz o seu anidrido. O ácido fumárico possui carboxilas muito afastadas para reagir.

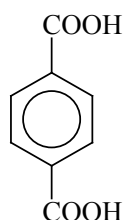
O ácido fumárico apresenta valores maiores de densidade devido ao fato de possuir molécula mais simétrica. Visto que as carboxilas do ácido maleico se encontram no mesmo plano espacial, elas podem interagir e sofrer uma desidratação intramolecular, liberando uma molécula de água e, assim, produzindo o anidrido maleico.



**Figura 58-** Ponto de Fusão e densidades dos ácidos maléico e fumárico.

A característica necessária para que a isomeria *cis-trans* ocorra em compostos de cadeia aberta é que os ligantes de cada átomo de carbono que realiza a ligação dupla sejam diferentes entre si e iguais aos ligantes do outro carbono.

O ácido tereftálico, **Figura 59**, é um sólido de , insolúvel em água e que é matéria-prima de polímeros do tipo poliéster, principal uso como precursor na formação do polímero de poliéster (PET), em combinação com o etilenoglicol, utilizado na produção de vestuário e garrafas plásticas.



ácido tereftálico

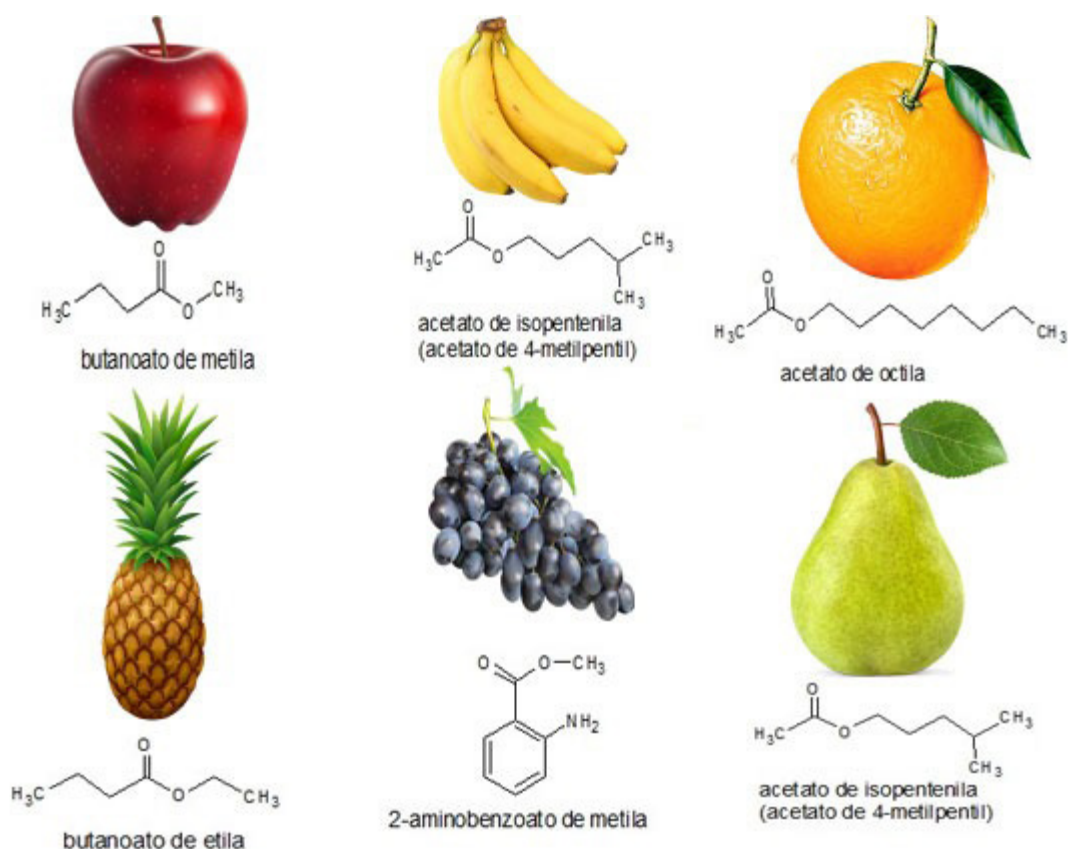
**Figura 59**– Molécula de ácido tereftálico (AT) é pouco solúvel em água e álcoois, por consequência, até cerca de 1970 a maior parte dessa substância bruta era convertida no éster dimetílico para purificação. Ele sublima quando aquecido.

## 5.5 ÉSTERES

Os ésteres são componentes essenciais das células de organismos vivos. Os mais simples são líquidos, incolores e de cheiro agradável, por isso, são utilizados como essências artificiais de frutos, isto é, são flavorizantes empregados em alimentos perfumes e medicamentos.

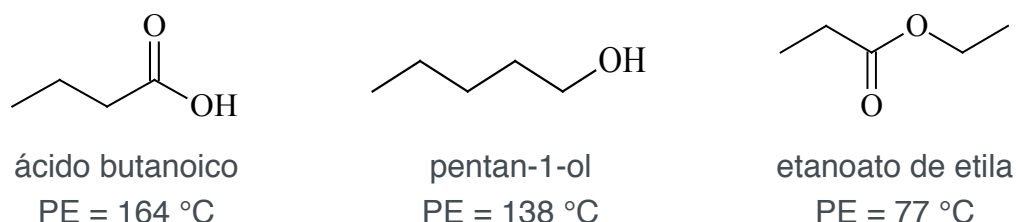
Os ésteres constituem aditivos de alimentos que conferem sabor e aroma artificiais aos produtos industrializados. Vejamos alguns exemplos de essências usadas como aromatizantes artificiais pela indústria alimentícia (**Figura 60**):

- ✓ butanoato de etila, responsável pelo aroma de abacaxi em refrescos artificiais;
- ✓ metanoato de etila, confere o aroma artificial de groselha;
- ✓ etanoato de butila, éster que dá o sabor de maçã verde a chicletes e balas;
- ✓ acetato de pentila é componente da essência de banana, proporciona aroma artificial característico desta fruta;
- ✓ antranilato de metila: flavorizante que dá sabor artificial de uva nos refrescos;
- ✓ acetato de propila, quando presente em gomas de mascar, confere o sabor artificial de pera.



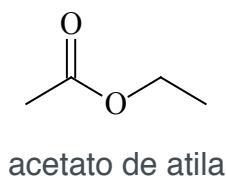
**Figura 60-** Alguns exemplos de essências usadas como aromatizantes artificiais pela indústria alimentícia.

À medida que a massa molecular cresce, a viscosidade também aumenta e os ésteres passam a ficar oleosos constituindo os óleos vegetais e animais. Os ésteres sólidos constituem as gorduras e as ceras. Não se associam por ligações de H, por isso os ésteres apresentam menores PE que os álcoois e ácidos carboxílicos de massas moleculares próximas como mostrado na **Figura 61**.



**Figura 61**– PE de ácido butanoico, pentan-1-ol e etanoato de etila.

Os ésteres são pouco solúveis em água e solúveis em solventes orgânicos. O acetato de etila, **Figura 62**, um líquido (PE = 77,1 °C) de aroma agradável, semelhante à essência de maçã, é pouco solúvel em água e bastante empregado como solvente em laboratório.

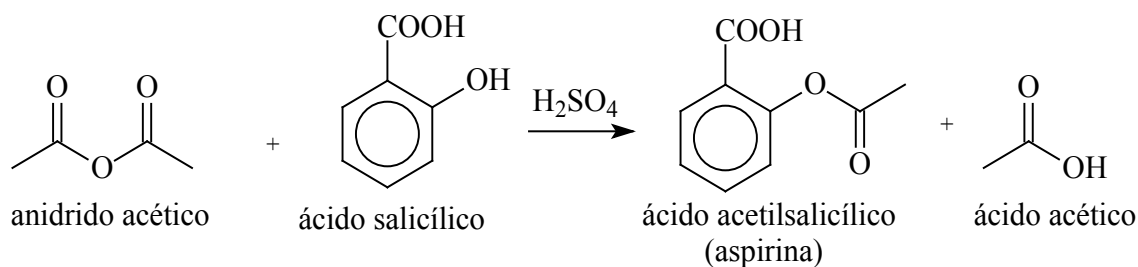


**Figura 62**– Estrutura molecular do acetato de etila.

## 5.6 ANIDRIDOS DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS

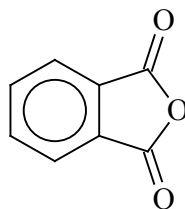
O anidrido mais simples é o acético, que é um líquido (PF = -73 °C; PE = 118 °C a 1 atm) insolúvel em água, de odor forte, semelhante ao do vinagre, pouco solúvel em água e bastante solúvel em solventes orgânicos. Somente os anidridos de massa moleculares elevadas se apresentam como sólidos de baixo PF. Os anidridos não se associam por ligações de H, por isso, possuem PE e solubilidade em água, inferiores aos outros compostos orgânicos de massas moleculares próximas.

O anidrido acético é utilizado na produção de aspirina (**Figura 63**), acetato de celulose, filmes fotográficos, fibras têxteis entre outros.



**Figura 63**– Reação de síntese da aspirina.

Outro composto muito importante na indústria e no laboratório é o anidrido ftálico, **Figura 64**, que é sólido e matéria-prima de resinas, plastificantes e fenolftaleína.



anidrido ftálico

PF=131°C; PE= 284°C a 1 atm

**Figura 64**– PF e PE do anidrido ftálico.

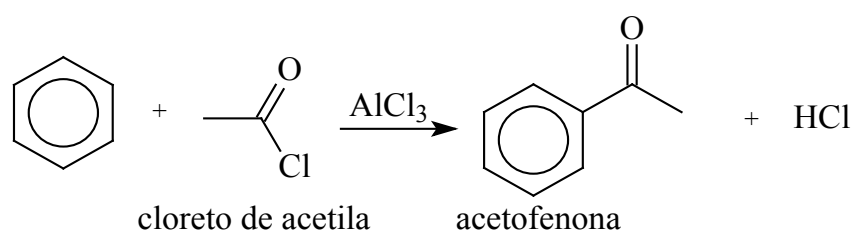
## 5.7 CLORETOS DE ÁCIDOS OU DE ACILA

Os fluoretos, brometos e os iodetos de ácido não possuem importância prática, dada a dificuldade de se obtê-los. Os cloretos de ácido ou de acila apresentam aroma pronunciado, irritante, devido ao fato de sofrerem hidrólise facilmente, produzindo o HCl e o ácido carboxílico, que possuem odores intensos e desagradáveis. Os PE dos cloretos de ácido (**Tabela 14**) são aproximadamente iguais aos dos aldeídos e cetonas de massas moleculares próximas, pois apresentam forças intermoleculares semelhantes.

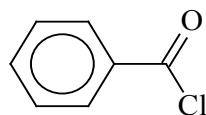
Substância	PF (°C)	PE (°C)
cloreto de acetila	-112	+51
cloreto de propanila	-94	+80
cloreto de butanoila	-89	+102
cloreto de pentanoila	-110	+128

**Tabela 14**– PF e PE de alguns cloretos de ácido.

Os cloretos de ácido sofrem hidrólise facilmente em água fria, devido à sua grande reatividade. São solúveis em solventes orgânicos. O principal representante é o cloreto de acetila, **Figura 65**, que é muito empregado em reações de acilação de Friedel-Crafts para obtenção de cetonas aromáticas. O cloreto de benzoila, **Figura 66**, é um líquido lacrimante de PE = 197,2 °C.



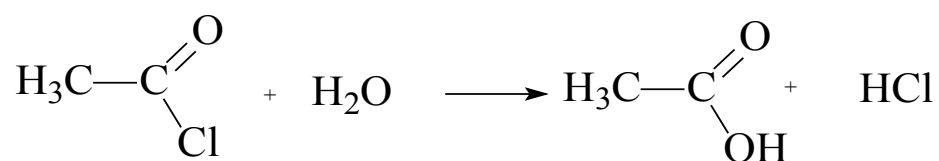
**Figura 65** - Reação de síntese da acetofenona.



Cloreto de benzoila

**Figura 66** - Molécula de cloreto de benzoila.

Os cloretos de ácido, **Figura 67**, sofrem hidrólise rápida até em condições brandas, produzindo os ácidos carboxílicos correspondentes. A reação abaixo ocorre a 0 °C e na ausência de catalisadores.



**Figura 67**– Reação de hidrólise do cloreto de acetila.

# FUNÇÕES NITROGENADAS

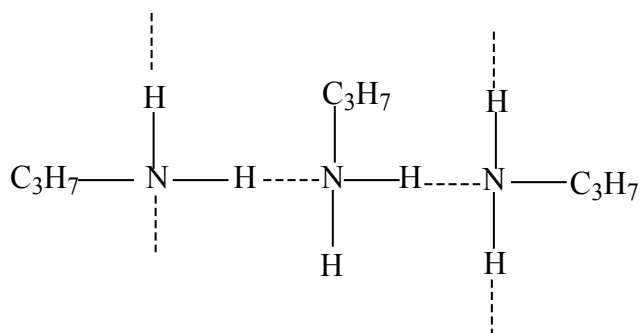
O elemento químico nitrogênio, está presente em uma grande quantidade de funções orgânicas, sendo que as amidas, aminas, nitrocompostos e nitrilas são as mais importantes. As amidas e aminas são, de longe, as principais classes de substâncias nitrogenadas, sendo que as primeiras constituem a matéria viva na forma de proteínas, enquanto as segundas são as bases orgânicas mais conhecidas.

Nitrocompostos são largamente utilizados como explosivos, dos quais se destaca o TNT, enquanto as nitrilas servem para produzir polímeros acrílicos, especialmente a pelúcia, bastante aplicada na indústria têxtil.

As outras classes de compostos nitrogenados (isonitrilas, oximas, sais de aminas, sais de amônio quaternários, oximas, azocompostos, etc.) apresentam menos aplicações práticas, por isso, não serão citadas neste livro.

## 6 | AMINAS

As aminas são, como a amônia ( $\text{NH}_3$ ), compostos polares e, com exceção das aminas terciárias, podem estabelecer ligações de H intermoleculares. Na **Figura 68** estão representadas as ligações H entre as moléculas de *n*-propilamina na fase líquida.



**Figura 68** - Ligações de H entre moléculas de *n*-propilamina.

Os PE das aminas são mais elevados que os compostos apolares de massas moleculares semelhantes e mais baixos que os dos álcoois e ácidos carboxílicos, pois as ligações de H produzidas pelo nitrogênio são mais fracas que as geradas pelo oxigênio. As aminas, qualquer que seja a classe a que pertençam, possuem a possibilidade de formar ligações de H com a água. Por essa razão, as aminas mais simples são totalmente solúveis em água na temperatura ambiente. A linha divisória, no que tange à solubilidade em água, está localizada em seis átomos de carbono, isto

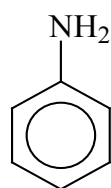
é, as substâncias com sete ou mais carbonos na molécula são insolúveis ou pouco solúveis nesse solvente. As aminas são mais solúveis em água que os álcoois, porque são mais básicas (**Tabela 15**).

Nome/Fórmula	PE (°C) a 1 atm	Solubilidade (g/100 g de H <sub>2</sub> O) a 25°C
isobutilamina (C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> NH <sub>2</sub> )	68	infinita
álcool isobutílico (C <sub>4</sub> H <sub>9</sub> OH)	156,5	10

**Tabela 15**– PE e solubilidade de isobutilamina e álcool isobutílico.

As aminas são solúveis em solventes menos polares, como o éter, o álcool, o benzeno entre outros. As metilaminas e etilaminas apresentam praticamente o mesmo cheiro que o amoníaco e as alquilaminas mais complexas cheiram nitidamente a peixe. As aminas aromáticas são, geralmente, muito tóxicas: são facilmente absorvidas pela pele, muitas vezes com consequências mortais. As aminas aromáticas são oxidadas facilmente pelo ar e, embora a maioria sejam incolores quando puras, aparecem frequentemente coloridas devido aos produtos de oxidação.

A anilina (**Figura 69**) é a principal amina que é um líquido (PF= - 6 °C; PE= 184 °C a 1atm) tóxico, pouco solúvel em água e bastante solúvel em soluções ácidas. Serve para produzir corantes, medicamentos, plásticos e acelerar o processo de vulcanização da borracha.



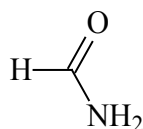
anilina

**Figura 69**- Molécula de anilina (fenilamina ou aminobenzeno). É um composto orgânico geralmente líquido, incolor e com um cheiro característico e desagradável. É usada para diversas funções, mas a que mais conhecemos e temos afinidade é na composição e obra-prima da fabricação de corantes, o nome anilina é erroneamente usado para caracterizar corantes que podem ser comestíveis, para tingir tecidos, massas e madeiras.

## 6.1 AMIDAS

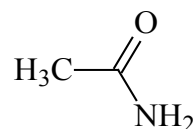
As amidas são derivadas dos ácidos carboxílicos, por isso, seus nomes usuais fazem uma referência ao ácido gerador. A 25 °C e 1 atm a formamida, **Figura 70**, é um líquido e acetamida é um sólido branco cristalino e solúvel em água. As amidas são solúveis em solventes orgânicos.





Formamida

PF= 3 ° C; PE= 200 ° C

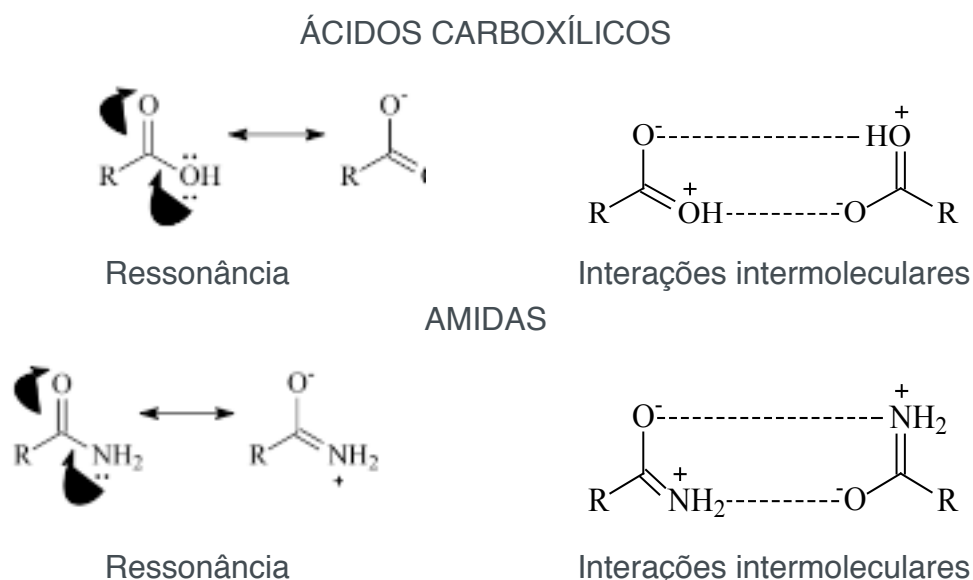


acetamida

PF= 82 ° C; PE=221 ° C

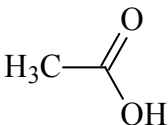
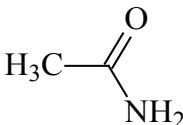
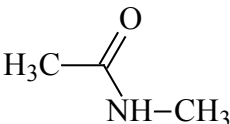
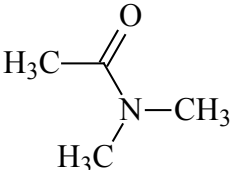
**Figura 70**– PF e PE da formamida e acetamida.

Os PE das amidas são superiores aos dos ácidos carboxílicos correspondentes, apesar de as massas moleculares serem aproximadamente iguais. Isso se deve ao fato de existirem forças intermoleculares (ressonância e ligações de H) mais intensas por parte das amidas. As formas de ressonância e as interações atrativas dos ácidos carboxílicos e amidas são mostrados na **Figura 71**.



**Figura 71**– Estruturas de ressonância e interações moleculares dos ácidos carboxílicos e amidas.

As interações entre as moléculas de ácido carboxílico envolvem o mesmo elemento (oxigênio) e, nas amidas, essas forças existem entre átomos de elementos diferentes, logo são mais intensas. Quando os átomos de H do amino (NH<sub>2</sub>) são substituídos por grupos metil (CH<sub>3</sub>), ocorre diminuição dos PF e PE, apesar do aumento da massa molecular (MM). Quando os átomos de H do amino (NH<sub>2</sub>) são substituídos por grupos metil (CH<sub>3</sub>), ocorre a diminuição dos PF e PE, apesar do aumento da massa molecular (MM) (**Tabela 16**).

Composto	Massa Molecular	PF (°C)	PE (°C)
 ácido acético	60 g/mol	16,6	118
 acetamida	59 g/mol	81	221
	73 g/mol	28	206
	87 g/mol	6	166

**Tabela 16**– PE de ácido acético e acetamida.

## 6.2 NITROCOMPOSTOS

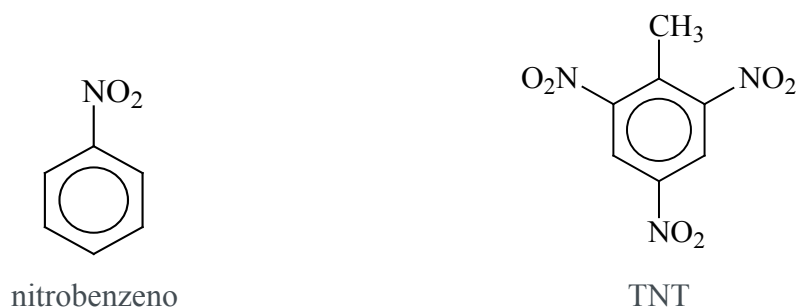
Os nitroalcanos são líquidos incolores mais densos que a água, de aroma agradável, não tóxicos, insolúveis em água e solúveis em solventes orgânicos. São substâncias muito polares, de modo que seus PF, PE e densidades são bem superiores aos dos nitritos isômeros.

Um exemplo desse fato está mostrado na **Tabela 17**, na qual o PE do nitrometano é muito superior ao do seu isômero nitrito de metila.

Composto	PE (°C)
 ácido acético	102
$\text{H}_3\text{C}-\text{O}-\text{N}=\text{O}$ nitrito de metila	-12

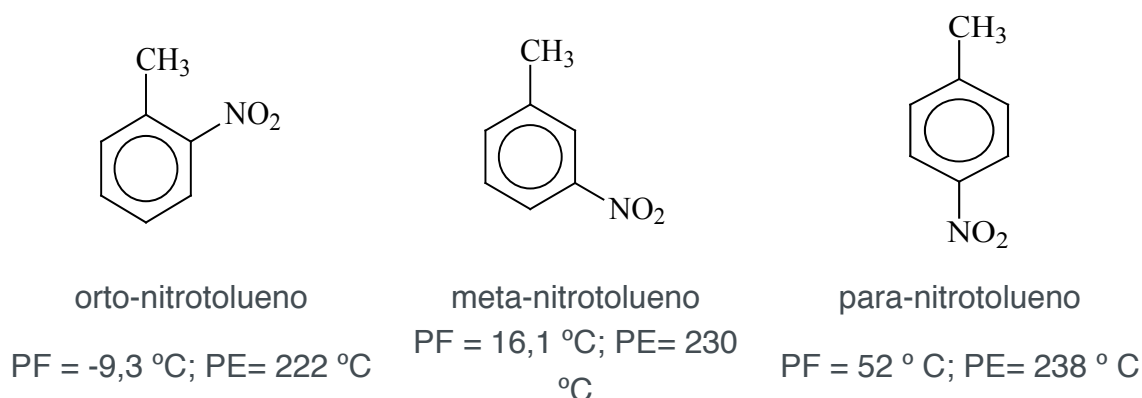
**Tabela 17**– PE de nitrometano e nitrito de metila.

O nitrobenzeno, **Figura 72**, é um líquido não volátil (PE = 211 °C a 1 atm) amarelado, insolúvel e mais denso que a água, venenoso e bom solvente para substâncias orgânicas. Os dinitro e trinitrobenzenos e toluenos são sólidos e explosivos.



**Figura 72**– Moléculas de nitrobenzeno e trinitrobenzeno (TNT).

O composto 2,4,6-trinitrotolueno (TNT) é um sólido explosivo de . Os isômeros *orto*, *meta* e *para*-nitrotolueno, na **Figura 73**, representados abaixo, evidenciam os efeitos da polaridade sobre o ponto de ebulição e da simetria sobre o ponto de fusão.



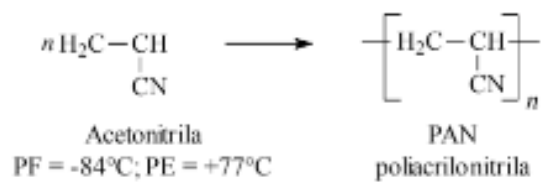
**Figura 73**– PF e PE de nitrotoluenos isômeros.

O isômero *para* apresenta os maiores PF e PE, devido à sua maior simetria e polaridade, respectivamente.

### 6.3 NITRILAS

As nitrilas ou cianetos orgânicos são compostos orgânicos nitrogenados que contém o grupo funcional – C = N. São compostos tóxicos, insolúveis em água e muito solúveis em solventes orgânicos. Nitrilas de 2 a 14 átomos de carbono são líquidas e as demais são sólidas a 25 °C e 1 atm. Apresentam altos PF e PE.

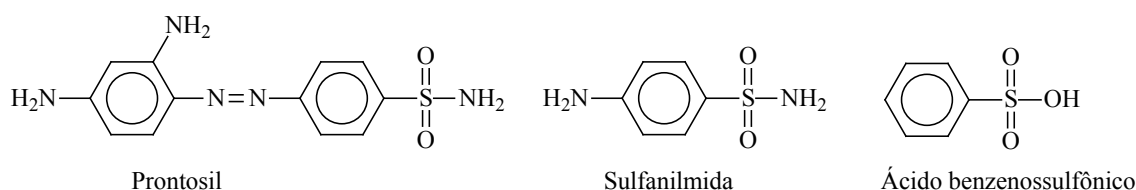
A nitrila mais importante é a acrilonitrila (**Figura 74**) que é um líquido incolor muito utilizado na produção de polímeros acrílicos, como o orlon ou pelúcia (PAN).



**Figura 74**– Reação de síntese da poliacrilonitrila (PAN).

# FUNÇÕES SULFURADAS

Os compostos de enxofre (*sulphur* do latim e *teion* do grego) mais importantes são os ácidos sulfônicos, tióis e tioéteres. Sulfóxidos e sulfonas não são cobrados na maioria dos vestibulares. As sulfas, antibióticos de amplo espectro, foram descobertas por G. Domagk em 1935. A filha desse médico havia sido contaminada por estreptococos e estava à beira da morte. Domagk observou que o corante prontosil (**Figura 75**) desenvolvido por uma indústria química alemã, inibia o crescimento de estreptococos. A administração oral de uma dose de prontosil salvou a jovem e Domagk foi agraciado com o prêmio Nobel de Medicina em 1939. O prontosil sofreu decomposição no organismo produzindo a sulfanilamida que possuía atividade antibacteriana. A sulfanilamida é um derivado do ácido benzenossulfônico.



**Figura 75**– Estruturas moleculares de prontosil, sulfanilamida e ácido sulfônico.

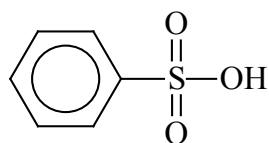
Os detergentes comuns são sais de ácido sulfônico e apresentam as vantagens de limparem em meio ácido e em água dura (solução aquosa contendo  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$  ou  $\text{Ca}^{2+}$ ). Os sabões (sais de ácidos graxos) não atuam em meio ácido, porque produzem os ácidos graxos que são fracos e insolúveis em água. Os cátions da água dura produzem compostos insolúveis com o ânion do sabão. Os sabões são biodegradáveis, porque derivam de ácidos graxos que são os alimentos naturais dos agentes decompositores. Os detergentes biodegradáveis apresentam cadeias normais semelhantes às dos ácidos graxos.

## 7 | ÁCIDOS SULFÔNICOS

Os ácidos sulfônicos são sólidos cristalinos, nas condições ambientes, bastante solúveis em água, pois são ácidos fortes. A água dura não precipita os seus ânions, porque os sulfonatos de cálcio, magnésio e ferro são solúveis. Os ácidos sulfônicos são mais densos que a água.

O ácido benzenossulfônico (**Figura 76**) é um dos principais representantes. Ele forma cristais incolores deliquescentes ou uma espécie de folha sólida, branca e

cerosa, solúvel em água e etanol. É frequentemente armazenado em forma de sais de metais alcalinos. Sua solução aquosa é bastante ácida.



**Ácido benzenossulfônico**

PF = 44 °C; PE = 190 °C; d = 1,32

g.mL<sup>-1</sup>

Figura 76– Molécula de ácido benzenossulfônico.

O detergente comum é o sal de sódio do ácido *p*-dodecilbenzenossulfônico (Figura 77) e, ao contrário do sabão comum (C<sub>17</sub>H<sub>35</sub>COO·Na<sup>+</sup>), que produz solução básica, a solução do detergente é neutra.

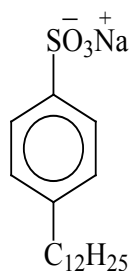


Figura 77– Estrutura do sal de sódio do ácido dodecilbenzenossulfônico.

Sabões e detergentes são agentes tensoativos aniônicos, pois reduzem a tensão superficial da água e possuem carga negativa na parte orgânica da molécula. Existem também os detergentes catiônicos que são os sais de amônio quaternário que possuem, pelo menos, uma cadeia longa, necessária para solubilizar gorduras impregnadas de sujeira. Esses compostos resultam da reação de aminas terciárias com um haleto orgânico, como mostra a Figura 78 abaixo.

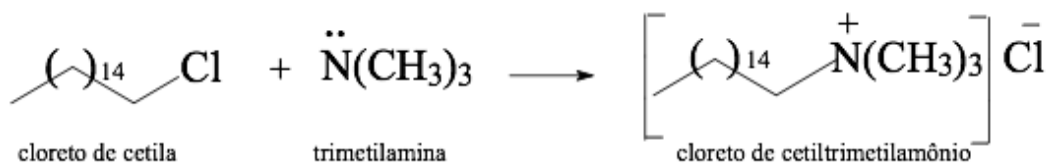
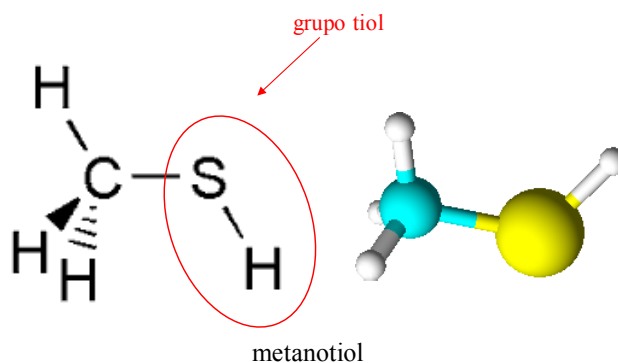


Figura 78– Reação de formação de um detergente catiônico.

## 7.1 TIOÁLCOOIS, TIÓIS OU MERCAPTANAS

Em química orgânica, **tioálcool** é um composto organossulfurado que contém um grupo -SH, designado por grupo tiol, grupo mercaptano ou grupo sulfidrilo ou sulfidrina. Os tióis mais simples possuem cheiro muito desagradável perceptível mesmo em quantidades ínfimas, por isso, são empregados para detectar vazamentos em gás de cozinha (**Figura 79**)



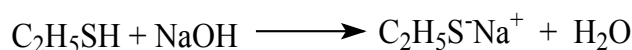
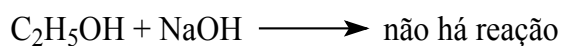
**Figura 79.** Estrutura do metanotiol, classificado como um tiol. É uma substância natural encontrada no sangue e no cérebro de humanos e animais, bem como nos tecidos vegetais. É eliminado através de fezes de animais. Também ocorre naturalmente em certos alimentos, como nozes e queijo. É um dos principais compostos responsáveis pelo mau hálito e pelo cheiro desagradável de flatulência.

Os tióis possuem PE inferiores aos dos álcoois correspondentes (**Tabela 18**), porque as mercaptanas não se associam por ligações de H (interação intermolecular). O butano-1-tiol é o responsável pelo mau cheiro da urina de gambá que constitui uma defesa contra predadores. O nome mercaptana deriva do latim mercuriumcaptans e quer dizer capturador de mercúrio.

Álcool	P E Tioálcool (°C)	P E (°C)
metanol (CH <sub>3</sub> OH)	64,5	metanotiol (CH <sub>3</sub> SH) 6
etanol (C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH)	78,3	etanotiol (C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> SH) 37
propano-1-ol (C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH)	97	propan-1-tiol (C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> SH) 67
propano-2-ol (C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH)	82,5	propan-2-tiol (C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> SH) 58
butan-1-ol (C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> OH)	118	butan-1-tiol (C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> SH) 98

**Tabela 18**– Temperaturas de ebulição de alguns álcoois e tioálcoois a 1 ATM.

Os tioálcoois são pouco solúveis em água e bastante solúveis em soluções básicas fortes, produzindo sais (**Figura 80**), pois os tióis são mais ácidos que os álcoois. A maior força ácida dos tioálcoois, em relação aos álcoois, é explicada pelo fato de a ligação S-H ser mais longa e, por isso, mais fraca que a ligação O-H, o que pode ser observado na **Tabela 19**. Os tióis formam sais insolúveis em água com íons metálicos pesados como chumbo, mercúrio e cobre.



**Figura 80**– Equação que demonstra a solubilidade e reatividade dos tioálcoois em solução básica.

Composto/Fórmula Geral	pKa*
álcool (ROH)	18
tioálcool (RSH)	12

$$*\text{pKa} = -\log\text{Ka}$$

**Tabela 19**– PKA de álcoois e tioálcoois.

## 7.2 TIOÉTERES OU SULFETOS

Tioéteres são compostos orgânicos que se assemelham estruturalmente e na nomenclatura com os éteres, mas contêm o elemento enxofre na composição em vez do oxigênio.

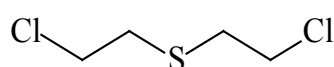
Apresentam PE superiores aos dos éteres correspondentes, porque os sulfetos possuem maiores massas moleculares. Possuem odor desagradável, são tóxicos, insolúveis em água e bastante solúveis em solventes orgânicos.

Os PE dos sulfetos crescem à medida que as massas moleculares crescem, pois, nesse caso, as forças intermoleculares também crescem, essa relação é mostrada na **Tabela 20**.

Sulfetos/Fórmula Molecular	PE (°C)
dimetilsulfeto ( $\text{CH}_3\text{SCH}_3$ )	37
dietilsulfeto ( $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{SCH}_2\text{CH}_3$ )	92
diisopropilsulfeto ( $\text{C}_3\text{H}_7\text{SC}_3\text{H}_7$ )	120
diisopropilsulfeto ( $\text{C}_5\text{H}_{11}\text{SC}_5\text{H}_{11}$ )	211

**Tabela 20**– PE de alguns sulfetos orgânicos.

A iperita, ou gás mostarda (**Figura 81**), foi utilizada como arma química na primeira guerra mundial. Trata-se de um agente vesicante, pois provoca queimaduras na pele originando bolhas.



Iperita

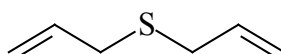
PF= 13 °C; PE = 217

°C

**Figura 81**– Estrutura molecular da iperita.



O sulfeto de alila (**Figura 82**), um constituinte líquido de alhos e cebolas, possui atividade antimicrobiana e aumenta a resistência do organismo para combater gripes e resfriados.



Sulfeto de alila

PE = 217 °C

**Figura 82**– Estrutura molecular do sulfeto de alila.

Em geral os tio éteres apresentam as seguintes propriedades:

- ✓ Geometria angular;
- ✓ Baixa polaridade;
- ✓ Insolúveis em água;
- ✓ Apresentam boa solubilidade em solventes como aldeídos, cetonas e éteres;
- ✓ São mais densos que a água;
- ✓ Os tioéteres com poucos carbonos (mais simples) são líquidos em temperatura ambiente, e os tioéteres com um maior número de carbonos são sólidos;
- ✓ Seus pontos de fusão e de ebulição são baixos quando comparados com os éteres;
- ✓ Apresentam baixa reatividade química, não participando, assim, de processos reacionais (reações químicas).

# COMPOSTOS HALOGENADOS

Em virtude de maior massa molecular, os haletos orgânicos apresentam maiores PE que os alcanos correspondentes. Os PE também crescem, à medida que o peso atômico do halogênio (X = F, Cl, Br e I) cresce, **Tabela 21**. Os compostos monofluorados e monoclorados são menos densos que a água, já os monobromados e os monoiodados possuem densidades acima de 1 g mL<sup>-1</sup>.

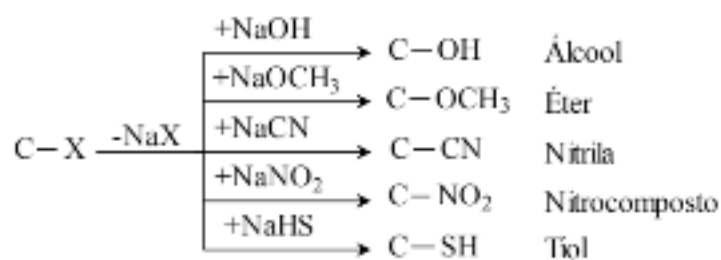
Composto	PE (1 atm)	Densidade a 20°C
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Cl	47	0,890
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> Br	71	1,335
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> I	102	1,747

**Tabela 21**– PE e densidades de alguns haletos orgânicos.

O diiodometano (CH<sub>2</sub>I<sub>2</sub>) é o líquido orgânico mais denso (d=3,32 g.mL<sup>-1</sup>) sendo utilizado como contraste em análise de minerais em microscopia. O perfluoropropano (C<sub>3</sub>F<sub>8</sub>) é um gás inerte empregado em cirurgias oftálmicas de descolamento de retina. No interior do olho, o gás se expande produzindo a reposição da retina.

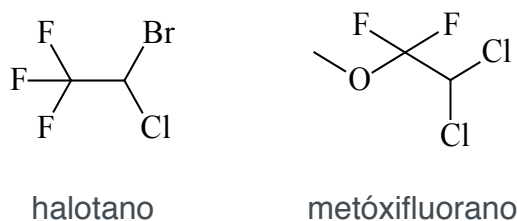
Os haletos orgânicos não são inflamáveis, por isso, muitos desses compostos podem ser utilizados como solventes em extrações que precisam de aquecimento. O iodofórmio (CHI<sub>3</sub>) é um sólido amarelo, insolúvel em água, que sofre sublimação nas condições ambientes.

Os compostos halogenados apresentam inúmeras aplicações práticas: inseticidas, solventes, antissépticos e muitas outras, porém a principal aplicação deles, na atualidade, está em sínteses orgânicas, **Figura 83**.



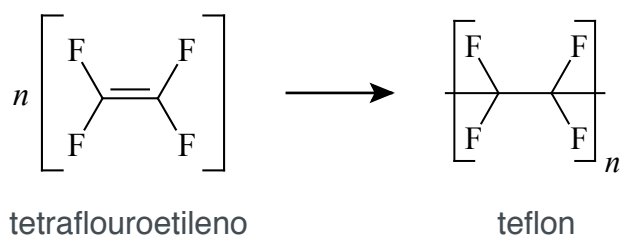
**Figura 83**– Algumas sínteses por meio de haletos orgânicos.

Alguns compostos poli-halogenados (**Figura 84**) são empregados na medicina como anestésicos gerais administrados por via oral. Os mais conhecidos são o halotano e metóxifluorano.



**Figura 84**– Estruturas moleculares dos anestésicos halotano e metóxifluorano.

O polímero teflon (**Figura 85**) é resistente a quase todos os reagentes químicos e é largamente utilizado para preparar superfícies antiaderentes que revestem panelas e frigideiras. O monômero do teflon é o tetrafluoroetileno e a reação de polimerização está equacionada abaixo.



**Figura 85** – Reação de síntese do teflon.

O clorofórmio ( $CCl_3H$ ), **Figura 86**, possui propriedades anestésicas e foi empregado no parto cesariano da rainha Vitória quando ela deu luz ao príncipe Leopoldo em 1853. Esse fato desafiou a afirmação bíblica de que a mulher teria seus filhos com dor. Infelizmente, o clorofórmio foi abandonado como anestésico, pois afeta o fígado de seres humanos.

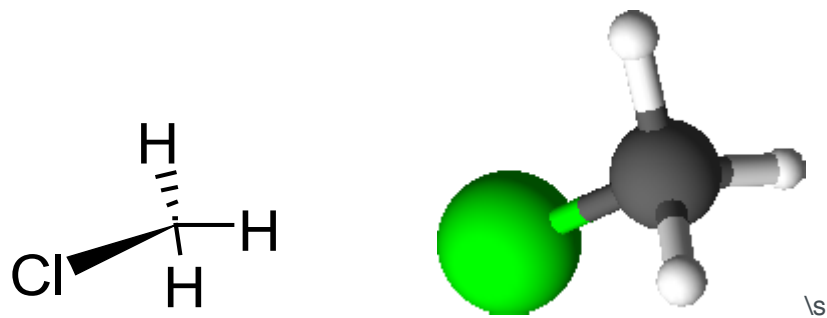
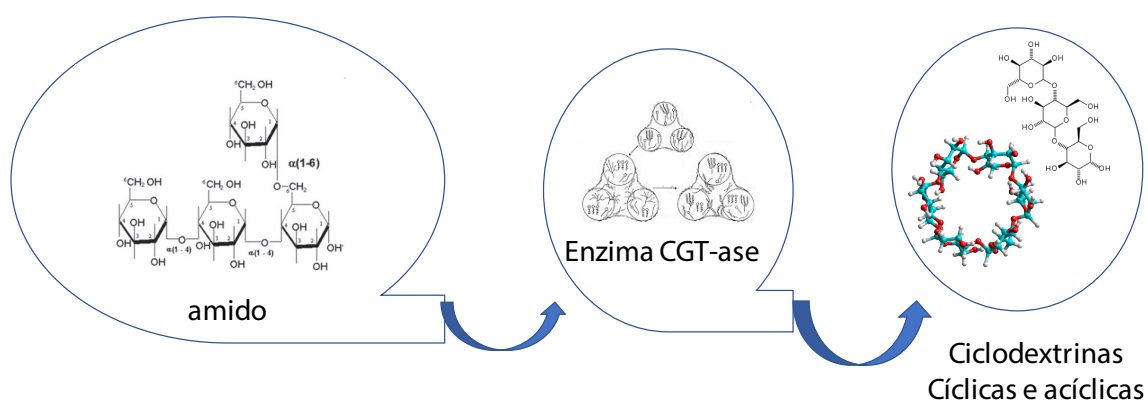


Figura 86– Molécula de clorofórmio com geometria tetraédrica.

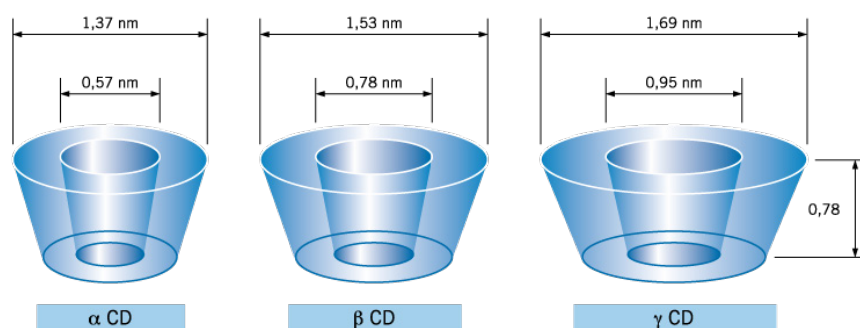
# COMPLEXO DE INCLUSÃO

As ciclodextrinas (CDs), **Figura 87**, são oligossacarídeos cíclicos, compostos por unidades de D-glicose, unidas por meio de ligações glicosídicas,  $\alpha$ -(1,4), e obtidas a partir da degradação do amido pela ação da enzima ciclodextrinaglicosiltransferase (CGTase). A CGTase é obtida a partir do microrganismo *Bacillus macerans*, que catalisa a formação de ligações  $\alpha$ -(1,4), promovendo a ciclização do amido, produzindo dessa forma uma mistura de CDs.



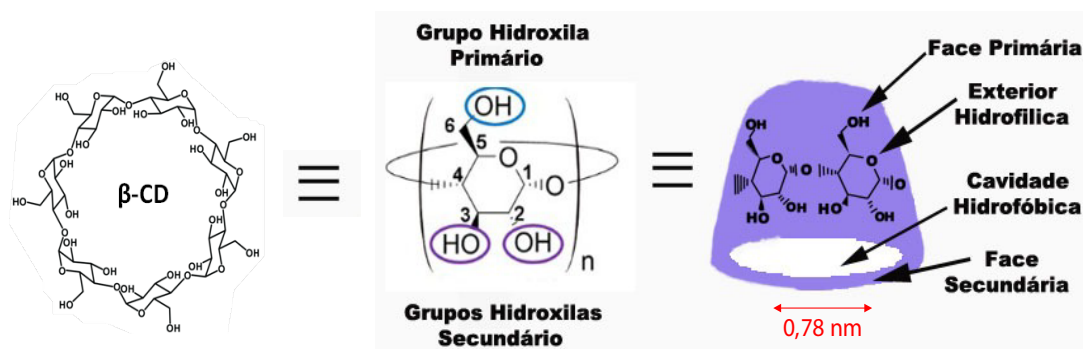
**Figura 87-** Formação de ciclodextrina pela degradação do amido pela enzima CGT-ase.

As CDs mais importantes são as de ocorrência natural conhecidas como  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$ -CDs, que possuem respectivamente, 6, 7 e 8 unidades de glicose. Devido aos diferentes números de unidade de glicose que compõem as ciclodextrinas naturais, que conferem diferentes dimensões, como é possível visualizar na **Figura 88**.



**Figura 88–** Ciclodextrinas naturais. O uso de ciclodextrinas (CDs) em aplicações farmacêuticas envolvendo solubilização, deve-se ao fato das CDs possuírem propriedades complexantes capazes de promoverem o aumento da solubilidade, dissolução e biodisponibilidade de fármacos pouco solúveis. Imagem, fonte:PracofarCosmetics [http://www.pracofar.com/images/01CYCLODEXTRIN\\_COMPLEX/cyclodextrin.png](http://www.pracofar.com/images/01CYCLODEXTRIN_COMPLEX/cyclodextrin.png)

Devido à sua estrutura, as CDs apresentam a habilidade de encapsular moléculas de baixa solubilidade em água produzindo um sistema hóspede-hospedeiro denominado de complexo de inclusão. Essa característica tem levado a aplicação das CDs nas mais variadas áreas da indústria como: alimentos; farmacêutica; cosmética; biotecnologia; química analítica; agricultura e tecnologia ambiental. A ciclodextrina natural mais utilizada na formação de complexo de inclusão é a  $\beta$ -CD (**Figura 89**), devido a uma série de fatores, tais como: apresentar baixo custo de produção; ser obtida com alto rendimento e qualidade; possuir cavidade com dimensões adequadas para acomodar a maioria das moléculas de interesse farmacêutico.



**Figura 89**– Estruturas química da  $\beta$ -ciclodextrina ( $\beta$ -CD), mostrando .

Na área farmacêutica, esse excipiente tem sido explorado, principalmente, no incremento da solubilidade, estabilidade e biodisponibilidade de medicamentos. Também se destaca sua utilização para mascarar odores e sabores desagradáveis de certos fármacos, para reduzir ou eliminar irritações oculares ou gastrointestinais e na prevenção de interações e incompatibilidades. A utilização das ciclodextrinas em medicamentos é uma realidade, a **Tabela 22** abaixo, mostra alguns medicamentos que utiliza na formulação o complexo de inclusão de fármacos encapsulados em  $\beta$ -CD. A Tabela 22, abaixo, mostra alguns medicamentos na forma de complexos de inclusão de fármacos encapsulados em  $\beta$ -CD.

<b>Fármaco</b>	<b>Nome Comercial</b>	<b>Indicação</b>	<b>Formulação</b>	<b>Fabricante/País</b>
<b>Benexate</b>	Ulgut, Ionmiel	Antiulcerogênico	Cápsulas	Teikoku/Japão
<b>Dexametasona</b>	Glymesason	Analgésico	Creme dérmico	Fujinaga/Japão
<b>Iodine</b>	Mena-Gargle	Antisséptico	Líquido tópico	Kyushin/Japão
<b>Nicotina</b>	Nicorette, Nicogum	Redução dos sintomas de abstinência	Comprimidos; gomas de mascar	Pharmacia Upjohn/Suécia
<b>Nimesulida</b>	Mesulid, Nimedex	Anti-inflamatório	Sachê oral	Novartis/Itália
<b>Nitroglicerina</b>	Nitropen	Dilatador coronário	Comprimido sublingual	NipponKayaku/Japão
<b>Omeprazol</b>	Omebeta	Antiulcerogênico	Comprimido	Betapharm/Alemanha
<b>PGE<sub>2</sub></b>	Prostarmon E	Indução de parto	Comprimido sublingual	Ono/Japão
<b>Piroxican</b>	Cicladol, Brexin	Anti-inflamatório	Comprimido, Sachê, Supositório	Masterpharma/Itália; Chiese/Itália
<b>Ácido tiaprofênico</b>	Surgamyl	Analgésico	Comprimido	Roussel-Maestrelli/Itália
<b>Óleo de alho</b>	Xund, Tegra, Allide, Garlenssence	Arteriosclerose	Drágea	Bipharm/Alemanha
<b>Cefalosporina</b>	Meiact	Antibiótico	Comprimido	MeijiSeika/Japão
<b>Difenildramina</b>	Stada-Travel	Antiemético	Comprimido mastigável	Stada/Alemanha
<b>Clordiazepóxido</b>	Transsillium	Ansiolítico	Comprimido	Gador/Argentina
<b>Cisaprida</b>	Coordinax, Prepulsid	Estimulante TGI	Supositório	Jassen/Bélgica
<b>Cetizirina</b>	Cetizitin	Antialérgico	Comprimido mastigável	Losan Pharma/Alemanha
<b>Dextrometorfa</b>	Rynathisol	Antitussivo	Solução oral	Synthelabo/França

**Tabela 22-** Medicamentos atualmente disponíveis no mercado mundial.

FONTE:CTD Holdings, Inc. 2015

A formação do complexo de inclusão ocorre pela substituição de moléculas de água existente no interior da cavidade hidrofóbica da  $\beta$ -CD por uma molécula hóspede apolar ou de baixa polaridade como, por exemplo, a sulcatona,

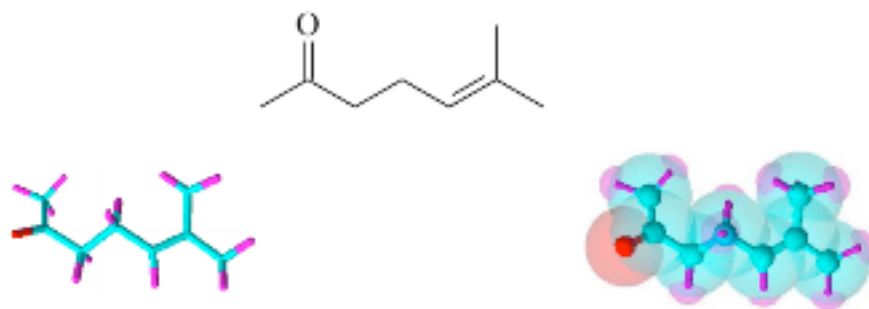
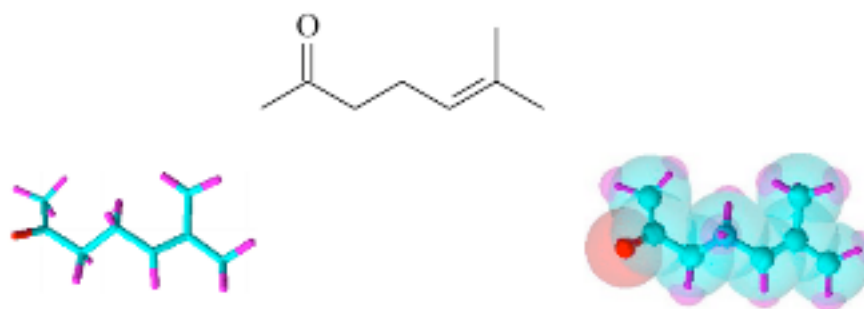
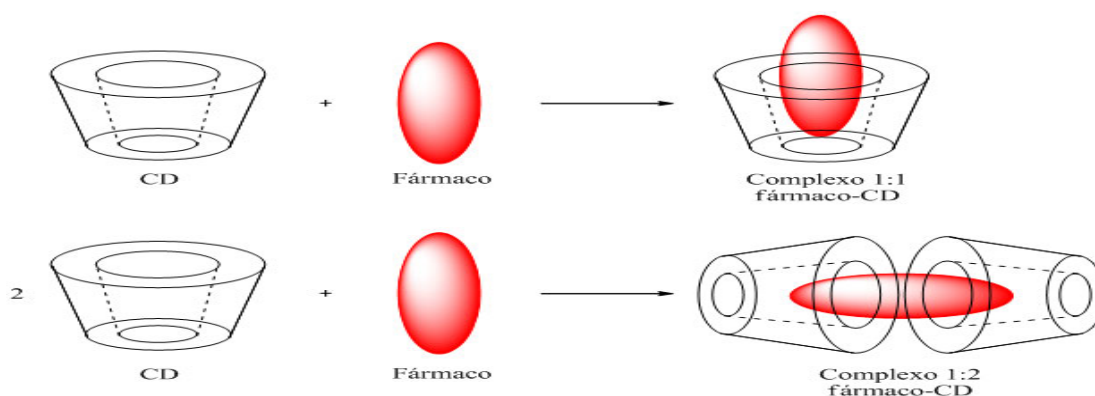


Figura 90.



**Figura 90-** Estrutura da sulcatona, construída usando software ACD/3D Viewer (Freeware).

Esse encapsulamento molecular ocorre sem a formação de ligações covalentes, sendo as forças de van der Waals as principais interações entre o hóspede (sulcatona) e o hospedeiro (CD). Outras interações, que podem ocorrer na formação e estabilização do complexo de inclusão, são as ligações de H, interações dipolo-dipolo e efeitos estéricos ou espaciais. Dependendo do tamanho da molécula hóspede a complexação pode ter várias estequiometrias, sendo que as principais proporções entre moléculas hospedeira e hóspede, na formação de complexo de inclusão, são de 1:1, 1:2 e 2:1. As principais estequiometrias, isto é, proporção entre moléculas hospedeira e hóspede, na formação de complexo de inclusão, são de 1:1, 1:2 e 2:1. A **Figura 91** mostra a formação do complexo de inclusão de 1:1.



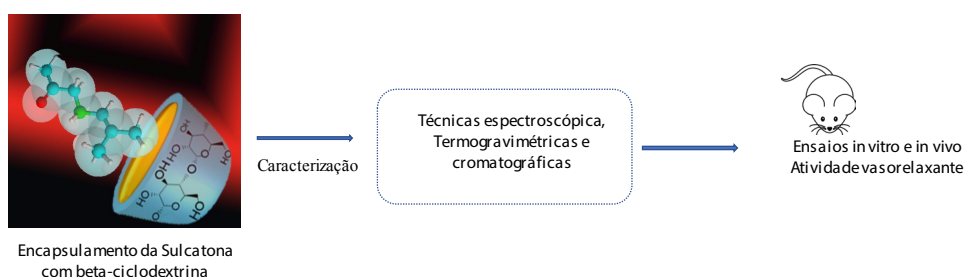
**Figura 91**– Mecanismo de formação de um complexo de inclusão com estequiometria de 1:1.

FONTE: Portal dos Fármacos. <https://encrypted-tbn0.gstatic.com/images?q=tbn:ANd9GcSHm-zngqeZuPEL5jMSVULclYgX2NyBP7hyiNfPGvjfqeOicOdfww>



As CDs funcionam como vetores de fármacos insolúveis. Os complexos de inclusão aumentam a biodisponibilidade e estabilidade de uma grande quantidade de substâncias, por isso, são amplamente utilizados nas indústrias químicas, farmacêuticas e diversos outros setores, como no controle de pragas na agricultura.

Utilizando tecnologias de ponta, as pesquisas têm se concentrado na obtenção de moléculas simples e baratas para o tratamento de doenças cardiovasculares, uma vez que são consideradas a principal causa de morte no mundo. o nosso grupo de pesquisa do Laboratório de Geoquímica Orgânica da UFPI (LAGO) produziu um complexo de inclusão de **sulcatona** (SU) em  **$\beta$ -ciclodextrina** ( $\beta$ -CD), utilizando um spray dryer e caracterizado por métodos espectroscópicos, térmicos e computacionais. Além disso, o sistema SU/  $\beta$ -CD foi avaliado em relação às suas propriedades vasorelaxantes, **Figura 92.**



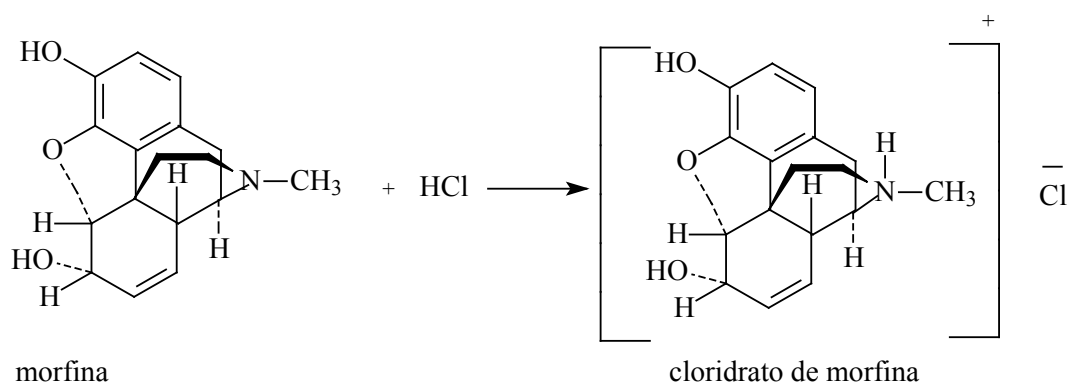
**Figura 92.** Formação, caracterização e ensaios do complexo de inclusão da sulcatona  $\beta$ -CD. A complexação da sulcatona foi capaz de aumentar o efeito vasorelaxante deste composto e melhorar a resposta farmacológica em doses menores, além de promover um claro aumento da solubilidade e estabilidade.

Evidências de inclusão podem ser propiciadas pelas técnicas de infravermelho (IV), difração de raios X (DRX), análise termogravimétrica (TGA), calorimetria exploratória diferencial (DSC) e ressonância magnética nuclear (RMN), as quais mostraram alterações significativas em relação ao material de partida. Por meio do estudo de liberação controlada, realizado pela técnica de *headspace* estático acoplado à cromatografia gasosa e espectrometria de massas (HS-CGEM), observou-se o aumento da estabilidade da sulcatona complexada. A atividade vasorelaxante da sulcatona foi avaliada *in vivo* denotando grande potencial dessa substância como fármaco.

Neste trabalho, nós observamos, por meio de um estudo de liberação controlada, o aumento da estabilidade térmica da sulcatona complexada em relação à sua forma livre, cuja estabilidade foi confirmada pelos resultados negativos das energias livres de Gibbs. A atividade cardiovascular da sulcatona foi avaliada por ensaios biológicos *in vivo* e *in vitro*. Observou-se que a sulcatona apresenta ação hipotensora e vasorelaxante em sua forma livre e pronunciado aumento da hipotensão em sua forma complexada em  $\beta$ -CD.

Certos fármacos insolúveis não podem ser encapsulados em ciclodextrinas, porque suas dimensões são incompatíveis com as da cavidade da CD. Alguns casos

são contornados por meio de alterações da molécula do fármaco por reações químicas, melhorando a solubilidade e sem prejuízo da ação terapêutica. Um exemplo desse caso é a transformação do analgésico morfina em seu sal (cloridrato de morfina), como ilustrado na **Figura 93**.



**Figura 93**– Reação de síntese do cloridrato de morfina.

A morfina possui solubilidade de apenas 1 g em 5 kg de água, a 20 °C e o cloridrato de morfina possui solubilidade de 1 g em 17,5 g de água, na mesma temperatura. A morfina alivia as dores de quaisquer origens, porém causa dependência química. O cloridrato de morfina é administrado por injeção subcutânea e é muito utilizado em casos de dores agudas sentidas por pacientes com câncer em estágio avançado.

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

Em geral, as propriedades físicas dos compostos orgânicos relacionam-se com a força de interação molecular, o tamanho da cadeia, a massa molecular e, ainda, pela simetria, pelo arranjo espacial. Alguns compostos têm suas moléculas fortemente ligadas e por isso possuem altos pontos de fusão e ebulição. A solubilidade também é afetada por essas características, assim como de acordo com as ramificações e a polaridade da molécula.

As inúmeras relações que os compostos orgânicos apresentam podem ser entendidas, em parte, pelo conhecimento das propriedades físicas dos mesmos que, por sua vez, decorrem de suas estruturas químicas, massas moleculares e forças intermoleculares. Esse conhecimento permite determinar, na maioria das vezes, os fatores responsáveis pelas variações das propriedades físicas dos compostos orgânicos, constituindo uma poderosa ferramenta de estudo, pois a quantidade de substâncias orgânicas é muito grande assim como o número de suas aplicações práticas.

Em alguns casos, essas variações só são determinadas experimentalmente, sendo (de certa forma) benéfica, pois irá estimular novas pesquisas para se determinarem as causas dessas alterações.

## REFERÊNCIAS

I-Livros

ALENCASTRO, R.B.; MANO, E.B. **Nomenclatura de compostos orgânicos**. Rio de Janeiro: Editora Guanabara, 1987.

ALLINGER, N.L. et al. **Química Orgânica**. 2.ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2009.

BARBOSA, L.C.A. **Introdução à Química Orgânica**. 2.ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2004.

BLACH, P.; FOURMENTIN, S.; LANDY, D.; CAZIER, F.; SURPATEANU, G. **Cyclodextrins: A new efficient absorbent to treat waste gas streams**. *Chemosphere*. v. 70, n. 3, p. 374-380, 2008.

BRUCE, P.Y. **Química Orgânica**. 1. v., 4. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2006.

CHANG, Raymond. **Físico-Química: para as ciências químicas e biológicas**. 3. ed. São Paulo: McGraw-Hill, 2008.

DIAS, A.R. **Ligação química**. 3.ed. Lisboa: Ist Press, 2018.

FELTRE, R. **Química Orgânica**. 7.ed. São Paulo: Moderna, 2008.

FOURMENTIN, S; CIOBANU, A.; LANDY, D.; WENZ, G. **Space filling of cyclodextrin and cyclodextrin derivatives by volatile hydrophobic guests**. *Beilstein Journal of Organic Chemistry*, v. 9, p. 1185-1191, 2013.

- HART, H; SCHUETZ, R.D. **Química Orgânica**. Rio de Janeiro: Editora Campus, 1983.
- MARTINS C. R.; LOPES, W. A.; ANDRADE, J. B.. SOLUBILIDADE DAS SUBSTÂNCIAS ORGÂNICAS. *Quim. Nova*, Vol. 36, No. 8, 1248-1255, 2013
- MCMURRY, J. **Química Orgânica**. 1. v., 6.ed.São Paulo: Thomson, 2005.
- MORITA, T.; ASSUMPÇÃO, R. M. V. **Manual de soluções, reagentes & solventes**.2. ed.São Paulo:Editora Edgard BlücherLtda, 2007.
- MORRISON, R.; BOYD, R. **Química Orgânica**. 6. ed. Lisboa: Fundação CalousteGulbenkian, 1996.
- OLIVEIRA, B.G.; ARAÚJO, R.C.M.U. SAPT: Ligação de hidrogênio ou interação de van der waals? **Química Nova**, v. 35,n. 10, p. 2002-2012, 2012.
- PANICO, R.; POWELL, W.H.; RICHER, J. C. **Guia IUPAC para a nomenclatura de compostos orgânicos**. Lisboa:Lidel, 2002.
- PERUZZO, F.M; CANTO, E.L.**Química na abordagem do cotidiano**.v.3,4.ed. São Paulo: Moderna, 2006.
- ROQUE, N.F. **Substâncias orgânicas**: estrutura e propriedades. São Paulo: Edusp, 2011.
- SEVERINO, A.J. **Metodologia do trabalho científico**.23.ed.São Paulo: Cortez Editora, 2013.
- SINGH, R.; BHARTI, N.; MADAN, J.; HIREMATH, S.N. Characterization of cyclodextrin inclusion complexes - A review. **Journal of Pharmaceutical Science and Technology**, v. 2, n. 3, p. 171–183,2010.
- SOLOMONS, T.W.G.; FRYHLE, C.B. **Química Orgânica**.1. v., 7. ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos Editora S.A, 2014.
- SZEJTLI, J. Introduction and general overview of cyclodextrins chemistry. **Chemical Reviews**,v. 98, n.5, p. 1743–1753, 1998.
- VEIGA, F.; PECORELLI, C.; RIBEIRO, L. **As ciclodextrinas em tecnologia farmacêutica**.1. ed. Coimbra: Minerva Coimbra, 2006.
- VENTURINI, C.G.; NICOLINI, J.; MACHADO, C.; MACHADO, V.G. Propriedades e aplicações recentes das ciclodextrinas.**Química Nova**, v.31, n. 2, p. 360-368, 2008.

## II Artigos Científicos

- Singh, R., Bharti, N., Madan, J., & Hiremath, S. N. Characterization of cyclodextrin inclusion complexes—A review. *Journal of Pharmaceutical Science and Technology* **2010**, *2(3)*, 171–183.
- Szejtli, J. Introduction and general overview of cyclodextrins chemistry. *Chemical Reviews* **1998**, *98(5)*, 1743–1753.
- Fourmentin, S., Ciobanu, A., Landy, D., & Wenz, G. Space filling of  $\alpha$ -cyclodextrin and  $\beta$ -cyclodextrin derivatives by volatile hydrophobic guests. *Beilstein Journal of Organic Chemistry* **2013**, *9*, 1185–1191.
- Wu, Y.; Zou, L., Mao, J., Huang, J.; Liu, S. Stability and encapsulation efficiency of sulfuraphane microencapsulated by spray drying. *Carbohydr. Polym* **2014**, *102*, 497-503.

## **SOBRE OS ORGANIZADORES**

**IVAN DOS SANTOS SILVA** é Doutorando em Química pela Universidade Federal do Piauí (UFPI), mestre, especialista e graduado em licenciatura plena em Química, pela UFPI. Apresenta conhecimento na área de Química, com ênfase em Produtos Naturais. Possui mais de 30 anos de experiência na área de ensino de ciências, atuando na rede de escolas particulares de Teresina como professor efetivo do Instituto Federal do Piauí.

**SIDNEY GONÇALO DE LIMA** é doutor em Ciências pela Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Mestre em Química pela Universidade Federal do Ceará (UFC) e Licenciado em Química pela Universidade Federal do Piauí (UFPI). Atualmente é Professor associado da UFPI, onde desenvolve pesquisas na área de Produtos Naturais e em Geoquímica Orgânica. Coordenador o Laboratório de Geoquímica Orgânica da UFPI, onde desenvolve Projeto P&D em parceria com a Rede de Geoquímica Orgânica da Petrobras. Tem orientado alunos de Iniciação Científica, Mestrado e Doutorado, e publicado vários artigos em revista nacionais e internacionais.

Agência Brasileira do ISBN

ISBN 978-85-7247-120-6



9 788572 471206