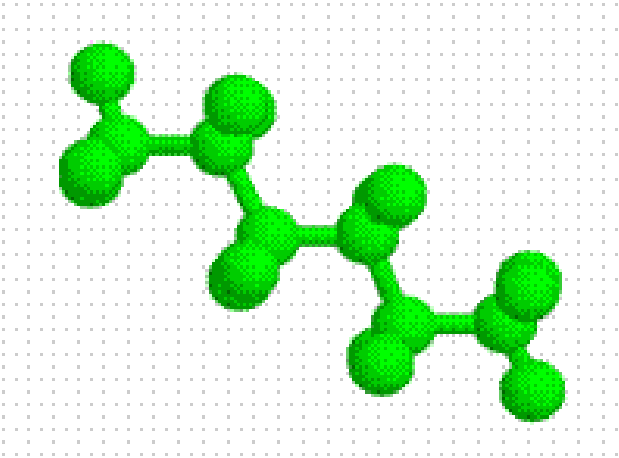
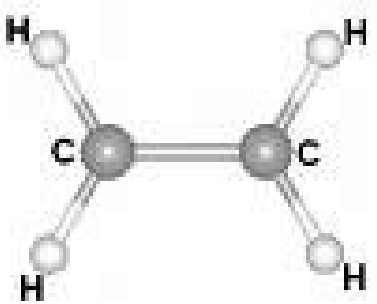
UNIDADE 2

ALCANOS

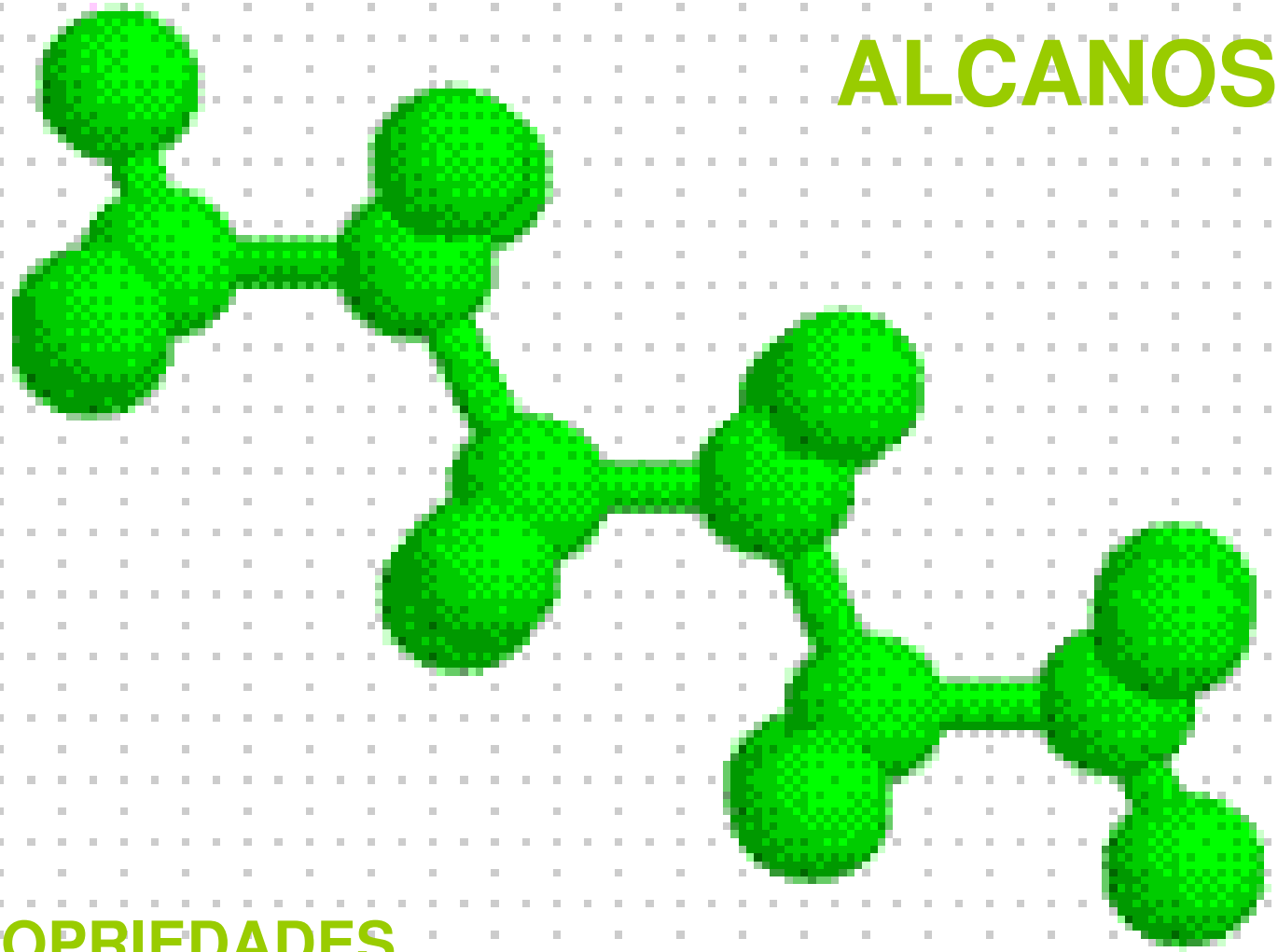


ALCENOS

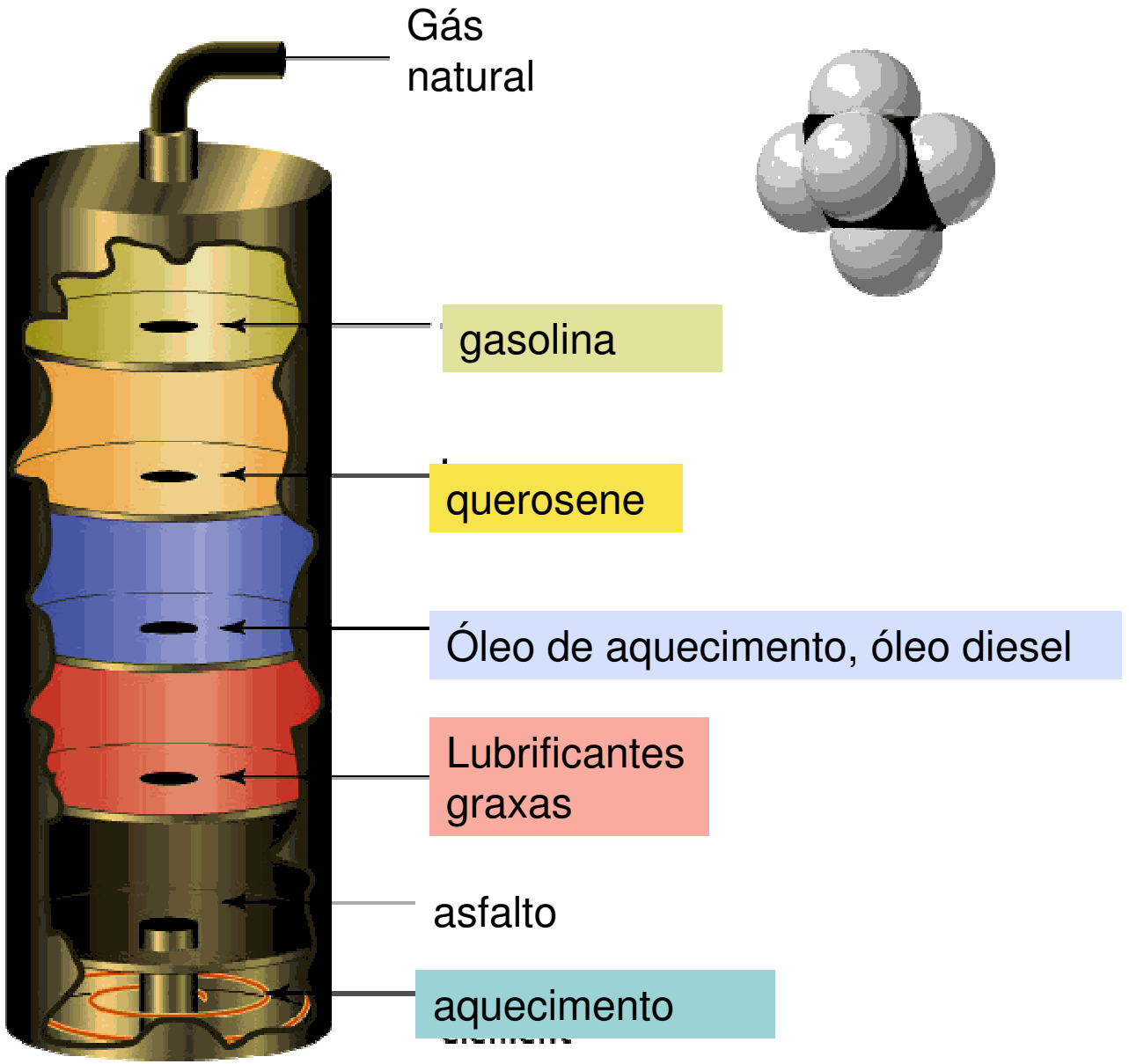


ALCINOS

ALCANOS



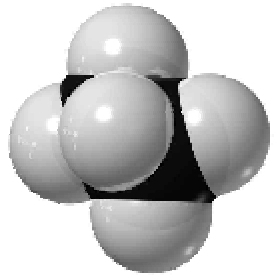
PROPRIEDADES

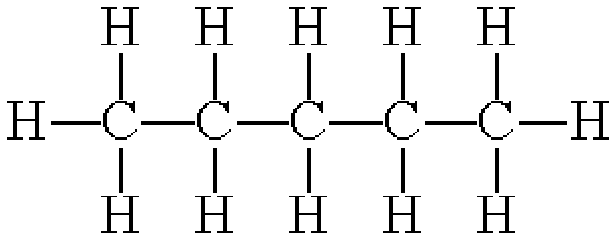

Gás
natural
gasolina
querosene
Óleo de aquecimento, óleo diesel
Lubrificantes
graxas
asfalto
aquecimento

PETRÓLEO - DESTILAÇÃO

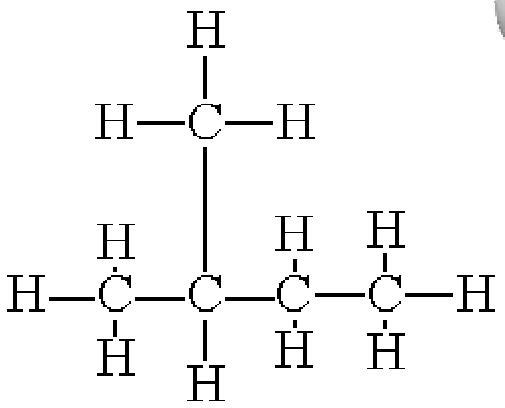
Fração	Temperatura de ebulição	Número de átomos de carbono
Gás	abaixo de 20º C	1 a 4
Éter de petróleo	20 - 60º C	5 a 6
Ligroína (nafta leve)	60 - 100º C	6 a 7
Gasolina natural	40 - 205º C	5 a 10 e cicloalcanos
Petróleo de iluminação	175 - 325º C	12 a 18 e aromáticos
Gasóleo	acima de 275º C	12 ou mais
Óleo de lubrificação	líquidos não voláteis	cadeias longas ligadas a ciclos
Asfalto ou coque do petróleo	sólidos não voláteis	estruturas policíclicas

Pentanos

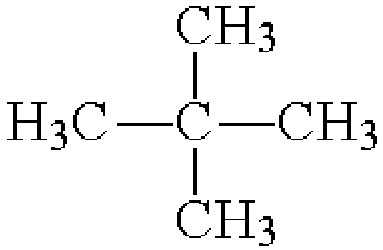




n-pentane, C_5H_{12}

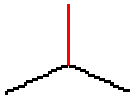
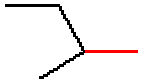
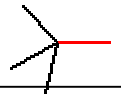
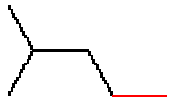
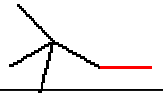


isopentane, C_5H_{12}

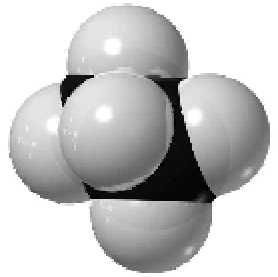


neopentane, C_5H_{12}

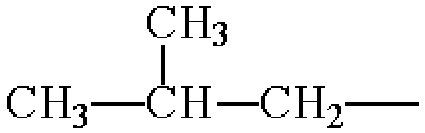
ISÔMEROS DE CADEIA

Radicais	Estrutura
Metil	$-CH_3$
Etil	$-CH_2CH_3$
Propil	$CH_2CH_2CH_3$
*Iso*propil 	
Butil 	
*Iso*butil 	
Sec-butil 	
Ter-butil 	
Pentil 	
*Iso*pentil 	
*Neo*pentil 	

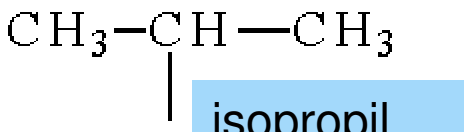
Substituintes alquílicos



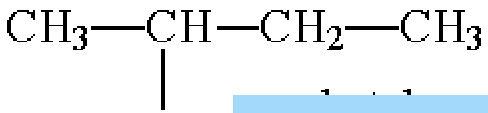
- CH_3-, metil
- CH_3CH_2-, etil
- $CH_3CH_2CH_2$-, *n*-propil
- $CH_3CH_2CH_2CH_2$-, *n*-butil



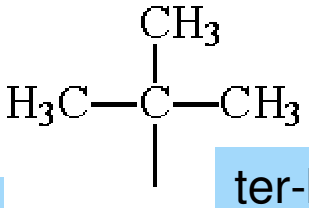
isobutil



isopropil

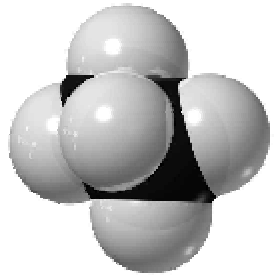


sec-butil

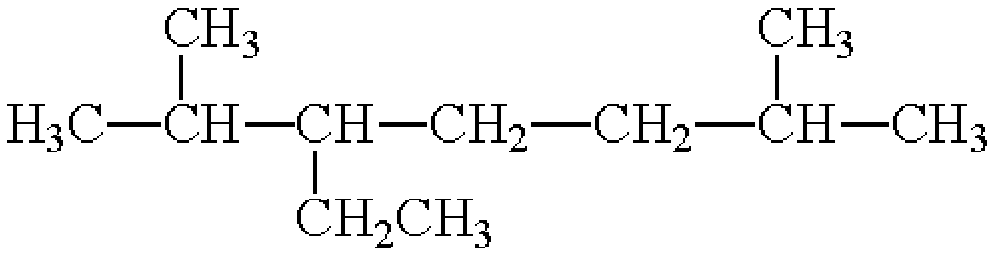


ter-butil

NOMENCLATURA

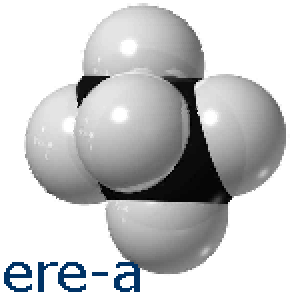


- **ORDEM ALFABÉTICA DOS SUBSTITUINTES**
- Ignore di-, tri-, etc.

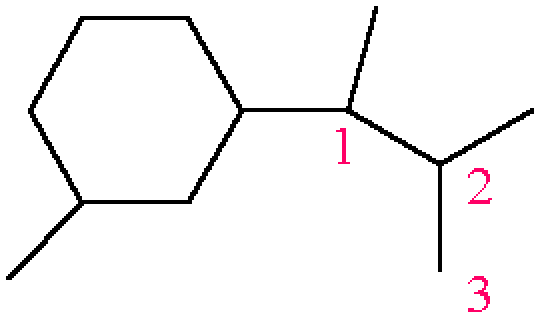


3-etil-2,6-dimetil-heptano

Substituintes complexos



- Se a ramificação tiver ramificações, numere-a a partir do carbono que se liga à cadeia principal.
- Nomei-␣ os substituintes da ramificação
- Use parênteses ( ) para nomes complexos



1-metil-3-(1,2-dimetilpropil)ciclohexano

PROPRIEDADES FÍSICAS

PONTO DE EBULIÇÃO X TAMANHO DE CADEIA

Cadeias linerares:

n-alcanos com até 4 carbonos são gasosos

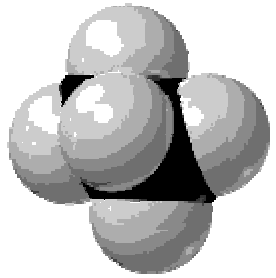
5 a 16 carbonos são líquidos

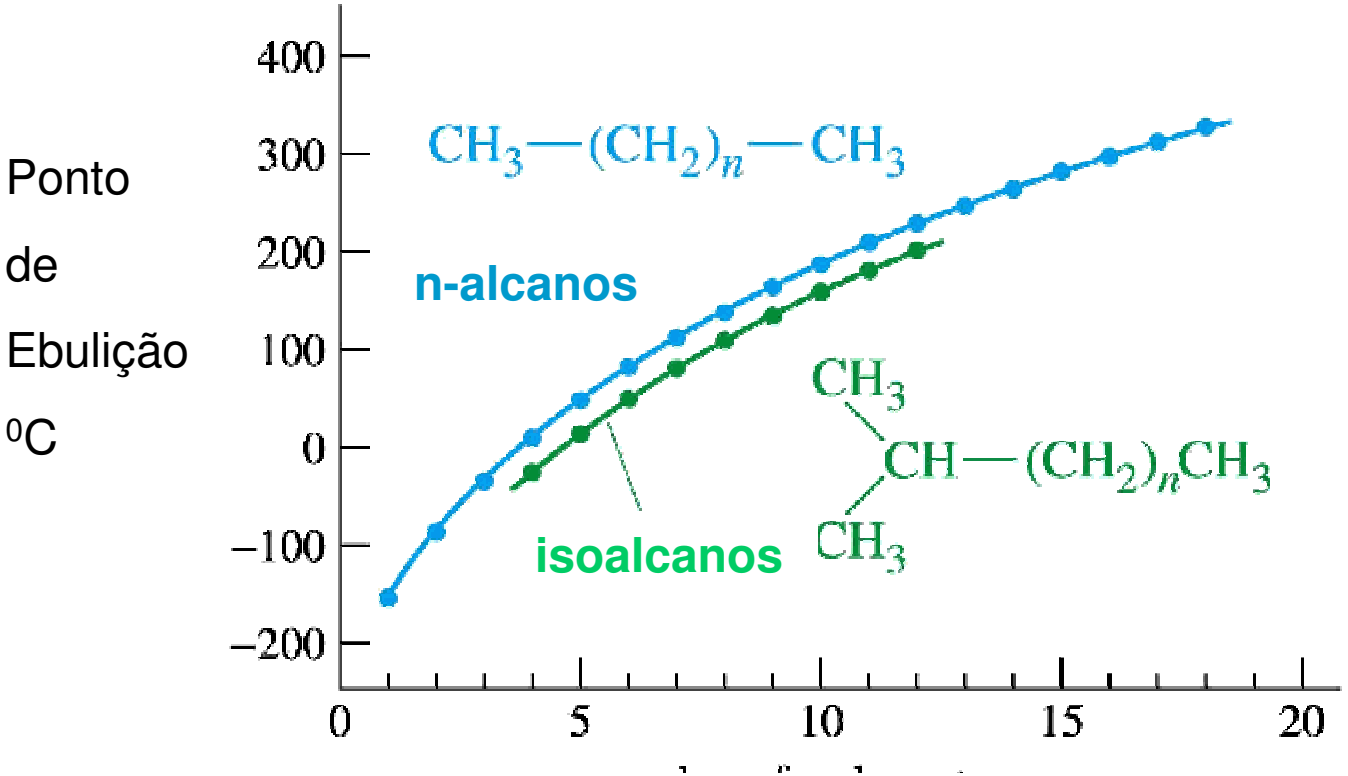
acima de 17 são sólidos

PE e PF aumentam com aumento da cadeia

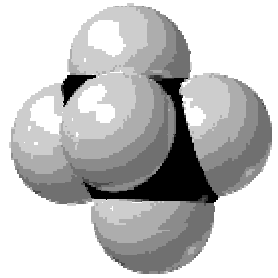
$T_{ebulição}$ de Alcanos

< área contato : < $T_{ebulição}$

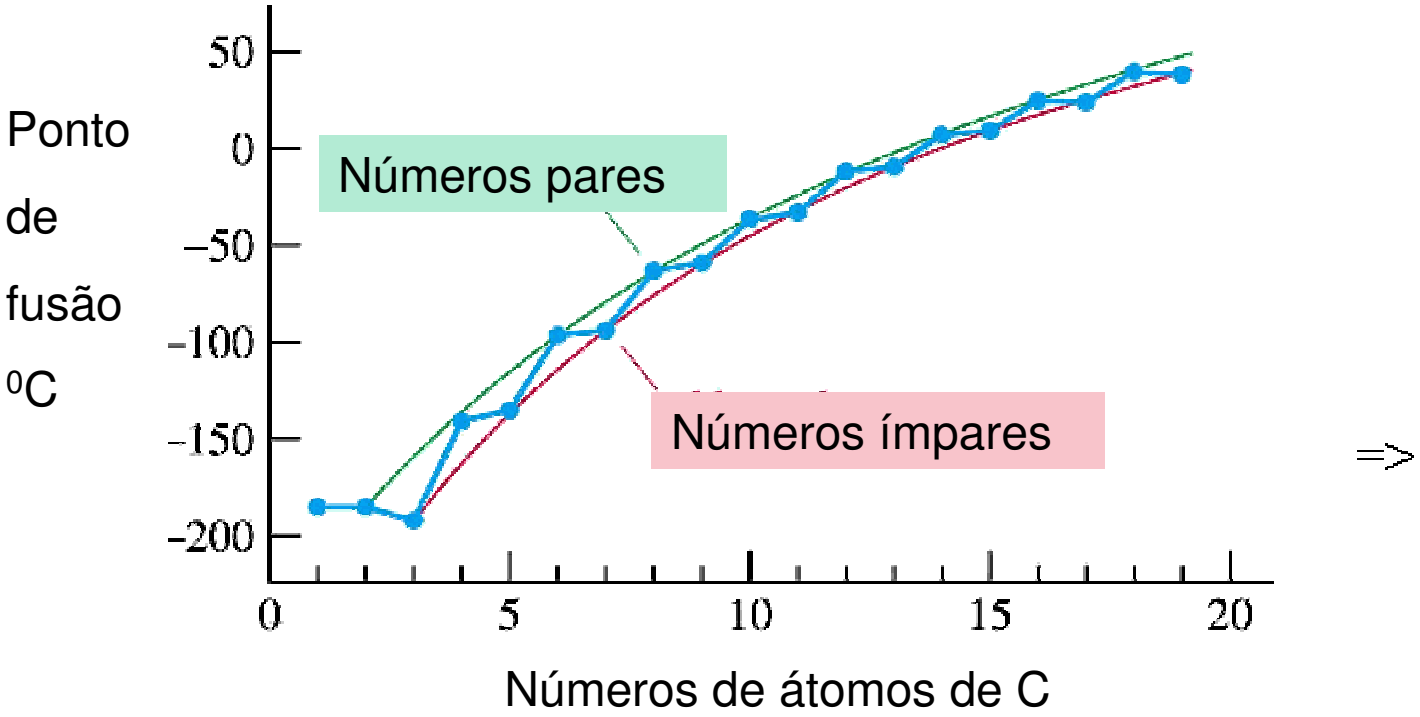




$T_{fusão}$ de Alcanos



Maior ramificação : mais esféricos : melhor empacotamento em estrutura cristalina : maior $T_{fusão}$



⇒

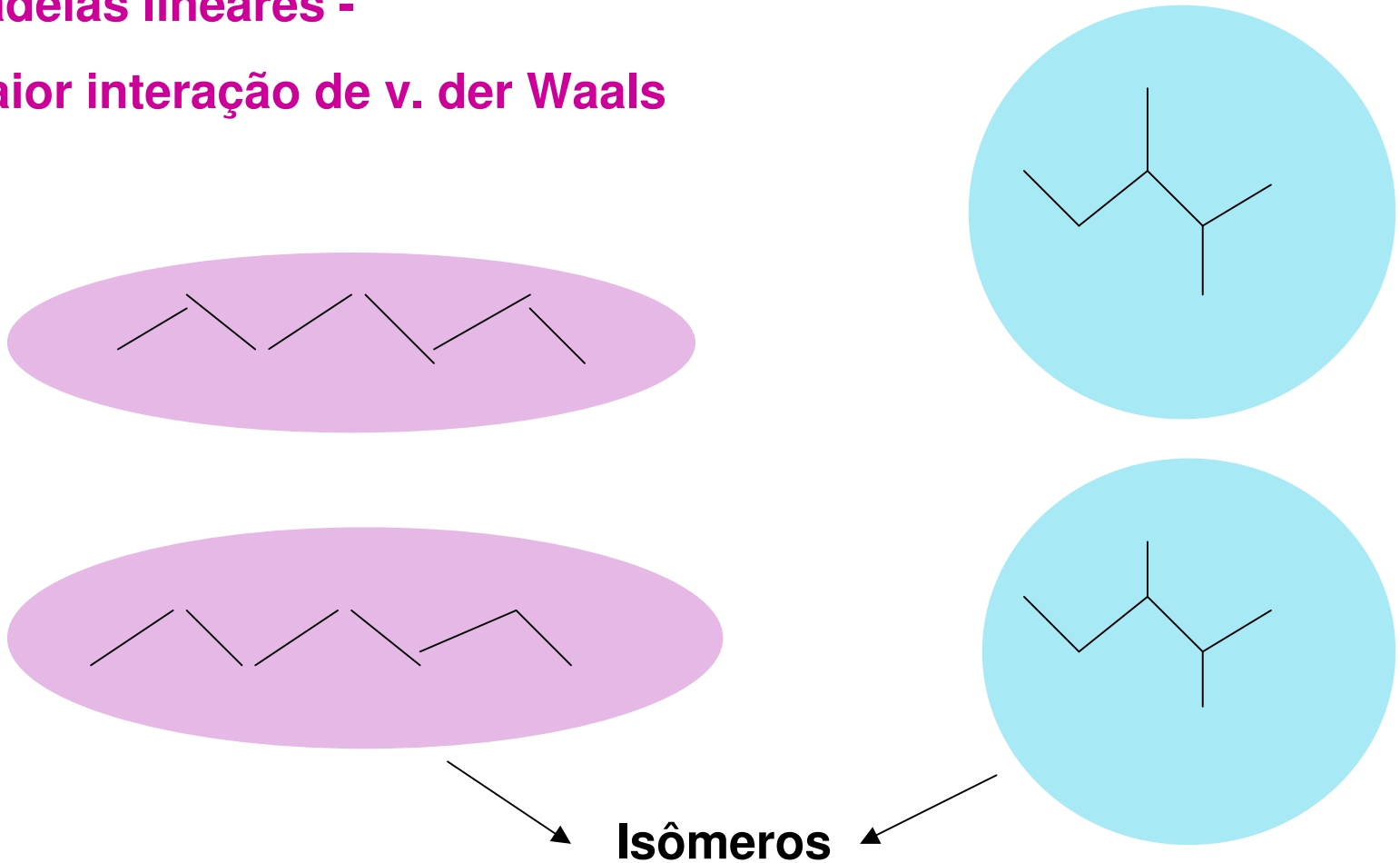
PONTO DE EBULIÇÃO X TIPO de CADEIA

Cadeia ramificadas –

Menor interação

Cadeias lineares -

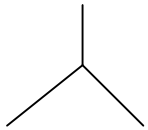
Maior interação de v. der Waals



Isômeros

Os alcanos isômeros apresentam diferenças no PE e PF.

butano PE = 0,8 ^{o}C e isobutano PE = -11,7 ^{o}C.

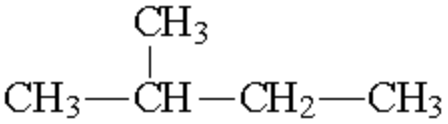


Alcano isômero com maior número de ramificações terá menor ponto de ebulição

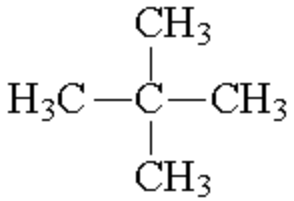
Dispersões de London

Ramificação diminui o PE pois diminui o contato (interação) entre as moléculas

n-pentano pe 36 ^{0}C



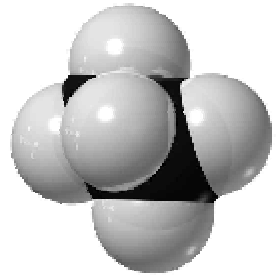
isopentano pe 28 ^{0}C



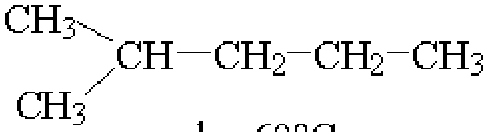
neopentano pe 10 ^{0}C

ISÔMEROS ESTRUTURAIS
(ou CONSTITUCIONAIS)

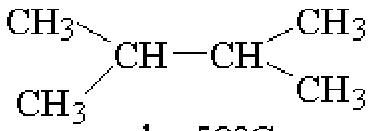
Alcanos Ramificados



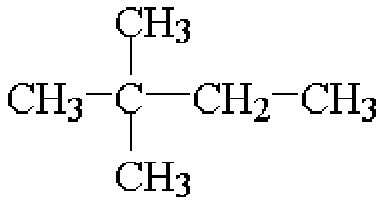
- Ramificação diminui $T_{ebulição}$
- Ramificação aumenta $T_{fusão}$



bp 60°C
mp -154°C



bp 58°C
mp -135°C



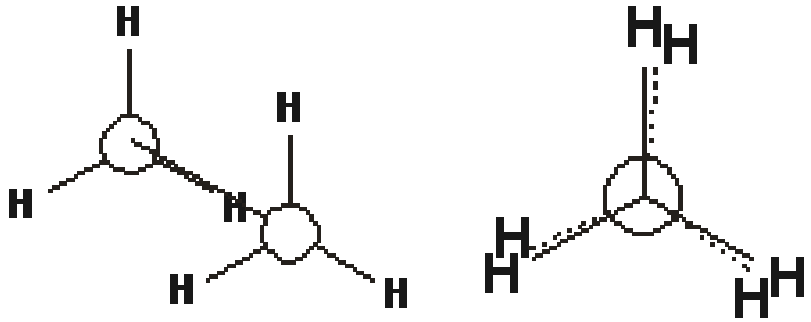
bp 50°C
mp -98°C

SOLUBILIDADE

Os alcanos, sendo moléculas apolares, dissolvem-se apenas em solventes apolares como benzeno e em outros alcanos líquidos (gasolina, querosene etc).

A densidade dos alcanos aumenta inicialmente com a massa molar, mas tende depois para um limite de cerca de 0,778, sendo todos, portanto, menos densos que a água.

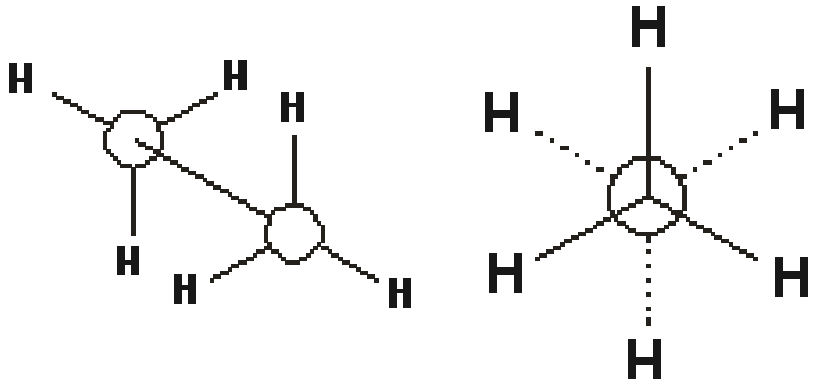
As conformações moleculares – ISOMERIA CONFORMACIONAL



Conformação **eclipsada**

ou

coincidente

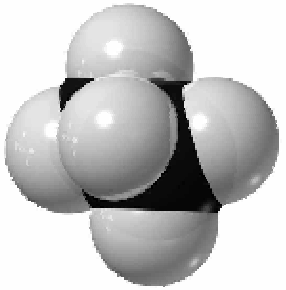


Conformação **alternada**

ou

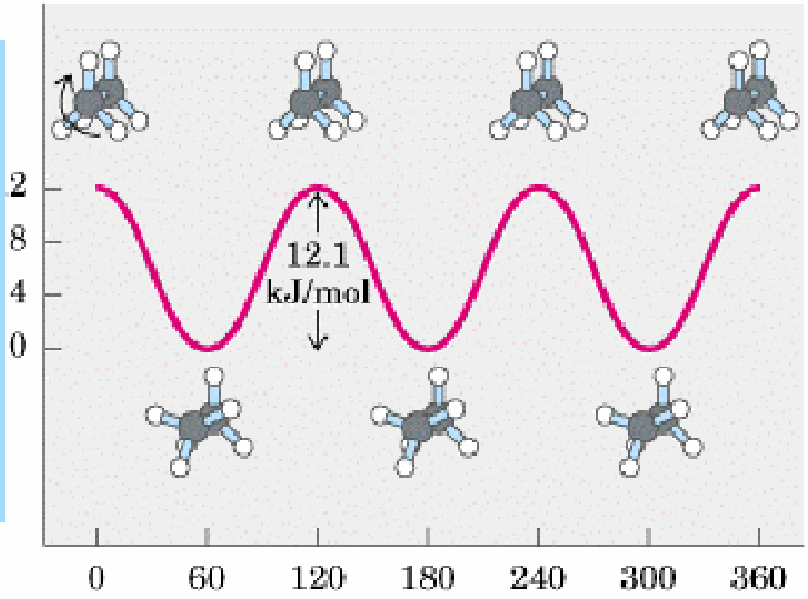
oposta

ETANO

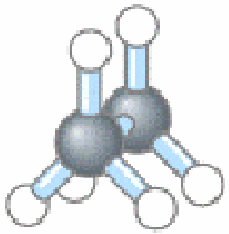


ENERGIA potencial

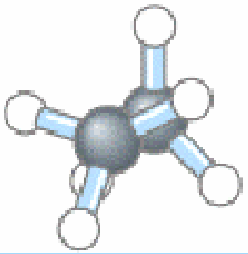
kJ/mol



Ângulo de torsão



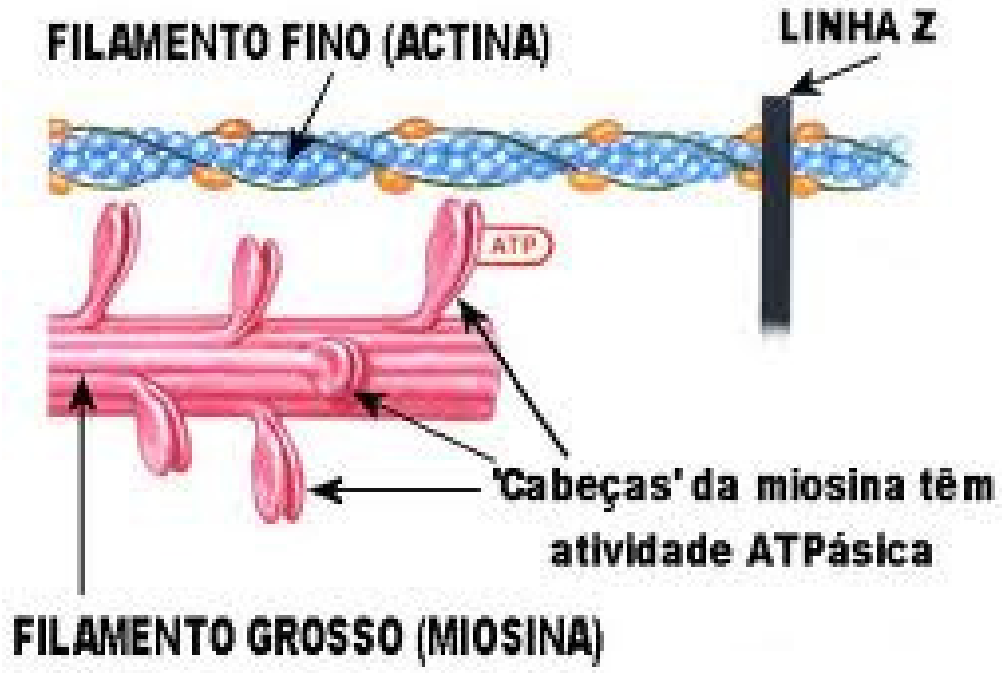
eclipsada



alternada

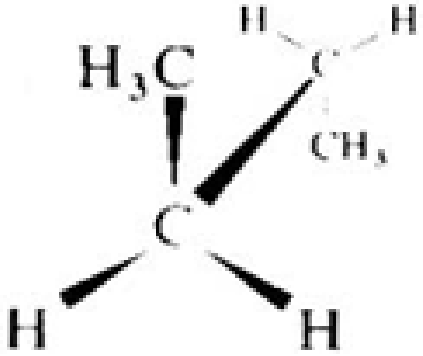
Energia de torsão: 3,0 kcal/mol (12 kJ/mol)

http://www.dqi.ufms.br/~lp4/QFL305Aula006.pdf

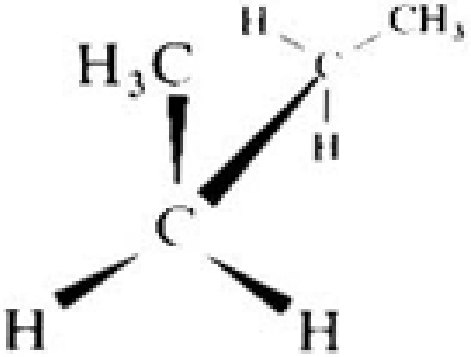


Contração e relaxamento muscular – dependem de conformações da miosina /actina

Butano

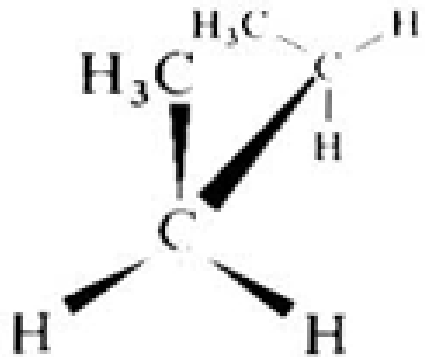


Anti



Vici

gauche

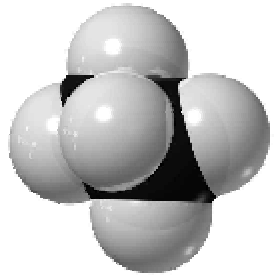


Vici

gauche

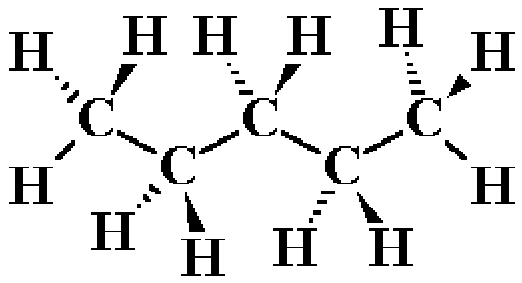
(CAVALETES)

Alcanos maiores



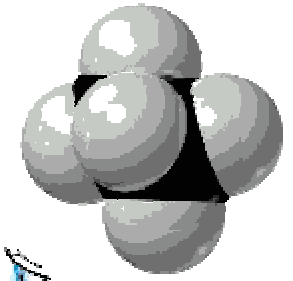
- Conformação *anti* = menor energia.
- "Cadeia linear" = zig-zag

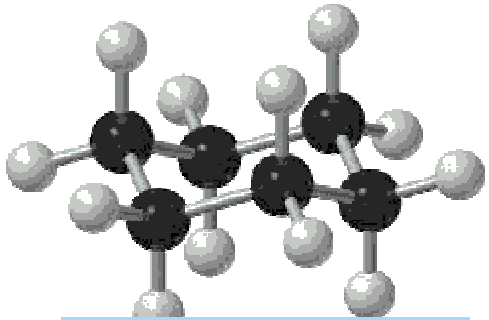
$CH_3CH_2CH_2CH_2CH_3$

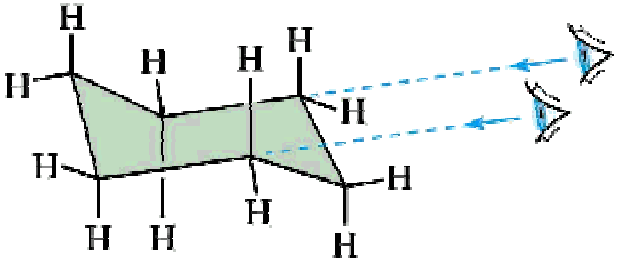


CICLOHEXANO

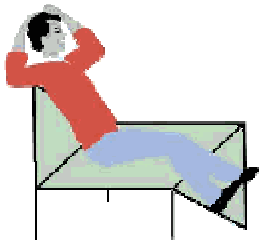
Conformações de cadeira

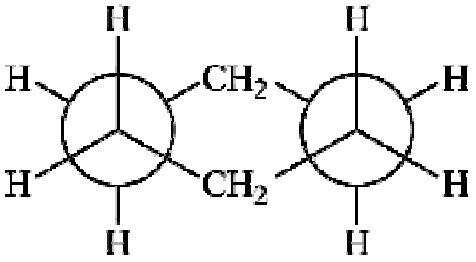






Conformação cadeira

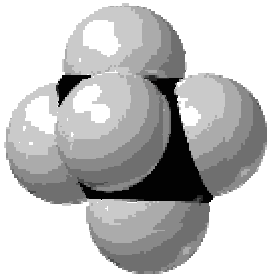


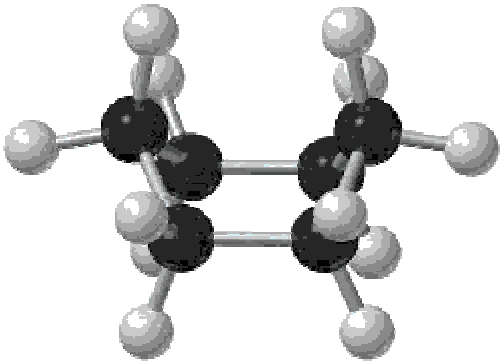


Newman projection

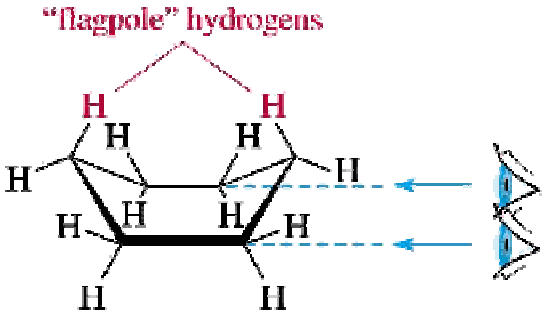
=>

Conformação barco

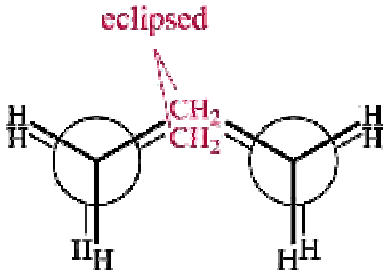




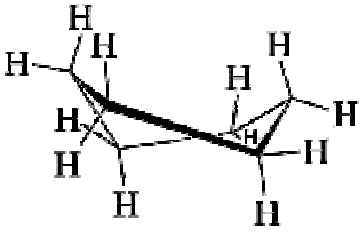
boat conformation



symmetrical boat



Newman projection

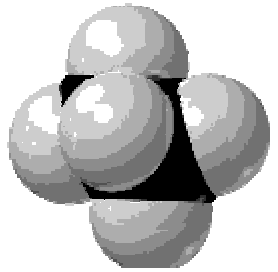


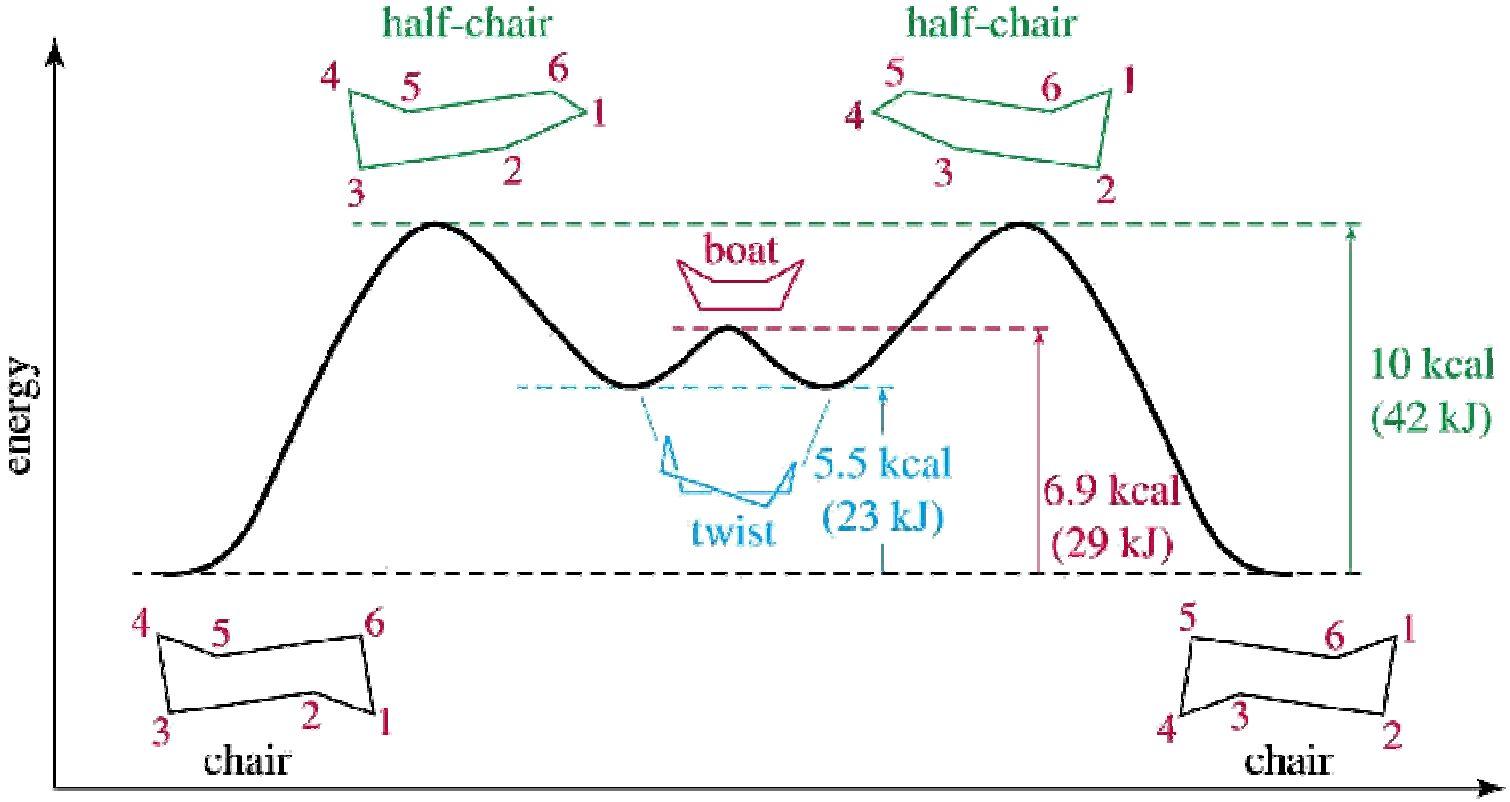
"twist" boat

=>

CICLOHEXANO

Energia Conformacional





PROPRIEDADES QUÍMICAS - REAÇÕES

HALOGENAÇÃO:

ALCANOS

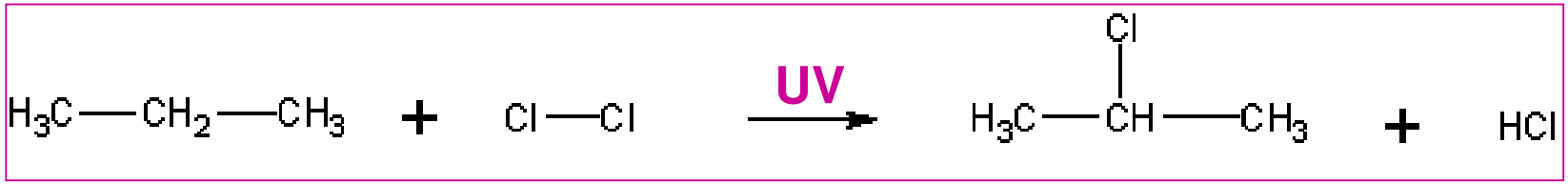
1º etapa: $Cl - Cl \longrightarrow 2\ Cl\cdot$ (cisão homolítica)

2º etapa: $H_3C - H + Cl\cdot \longrightarrow H_3C\cdot + HCl$

3º etapa: $H_3C\cdot + Cl - Cl \longrightarrow H_3C - Cl + Cl\cdot$

4º etapa: $2\ Cl\cdot \longrightarrow Cl - Cl$

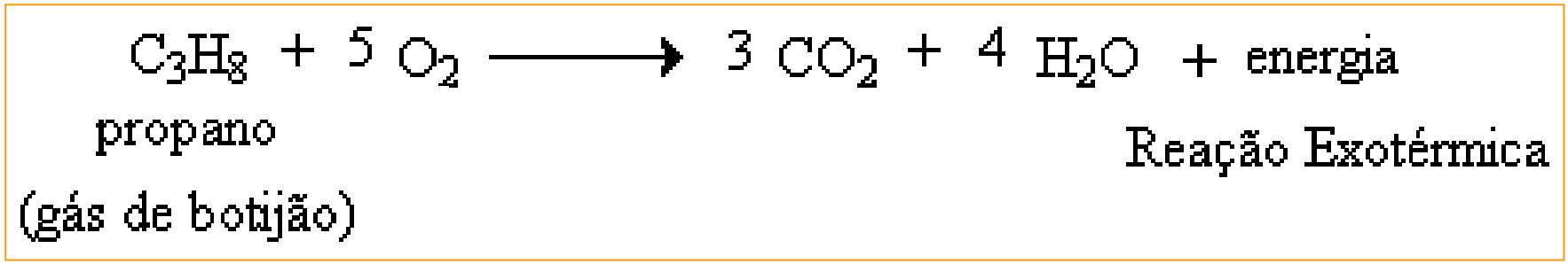
Reação Global: $CH_4 + Cl_2 \longrightarrow CH_3Cl + HCl$



NITRAÇÃO

SULFONAÇÃO

COMBUSTÃO



Queima incompleta forma CO (tóxico) e fuligem (C)

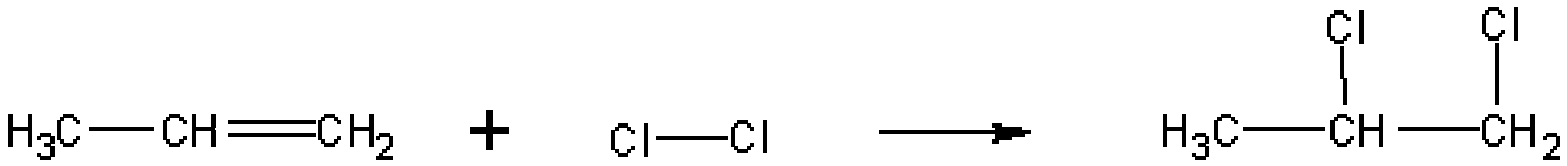
HIDROGENAÇÃO:

ALCENOS

Esta reação ocorre na superfície do catalisador, e é ele que provoca a quebra homolítica da ligação H-H.

Esta reação só ocorre na presença de catalisadores, como o Níquel, a Platina ou o Paládio metálicos, sendo também chamada de Hidrogenação Catalítica.

HALOGENAÇÃO



$CH_2 = CH_2 + Br_2 \longrightarrow CH_2Br\ CH_2\ Br$

eteno

1,2-dibromoetano

ADIÇÃO DE HALETO

$CH_3\,CH = CH_2 + HBr \longrightarrow CH_3\,CH\,Br\,CH_3$

propeno — 2-bromopropano

e só em menor escala:

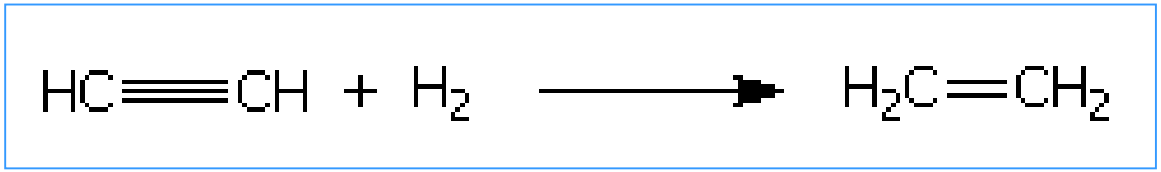
$CH_3\,CH = CH_2 + HBr \longrightarrow CH_3\,CH_2\,CH_2\,Br$

propeno — 1-bromopropano

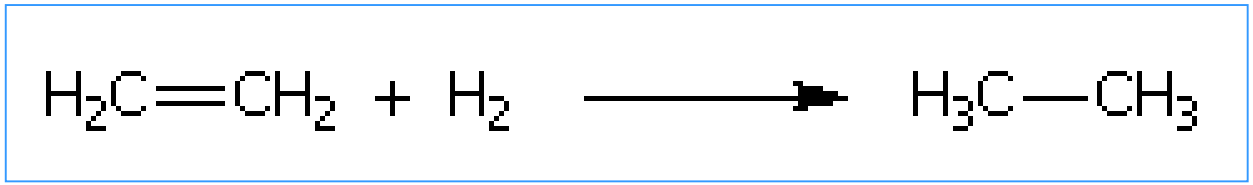
No caso de um alceno assimétrico como o propeno, $CH_3\,CH = CH_2$, então a adição à ligação dupla dá-se do seguinte modo: o átomo de H liga-se de preferência ao átomo C que já está ligado a maior número de átomos H, e o halogêneo ao outro (regra de Markovnikov - 1868).

ALCINOS

Se a reação é feita com um alcino, ele primeiro passa a alceno ...



E depois a ALCANO:



APLICAÇÃO: POLIMERIZAÇÃO

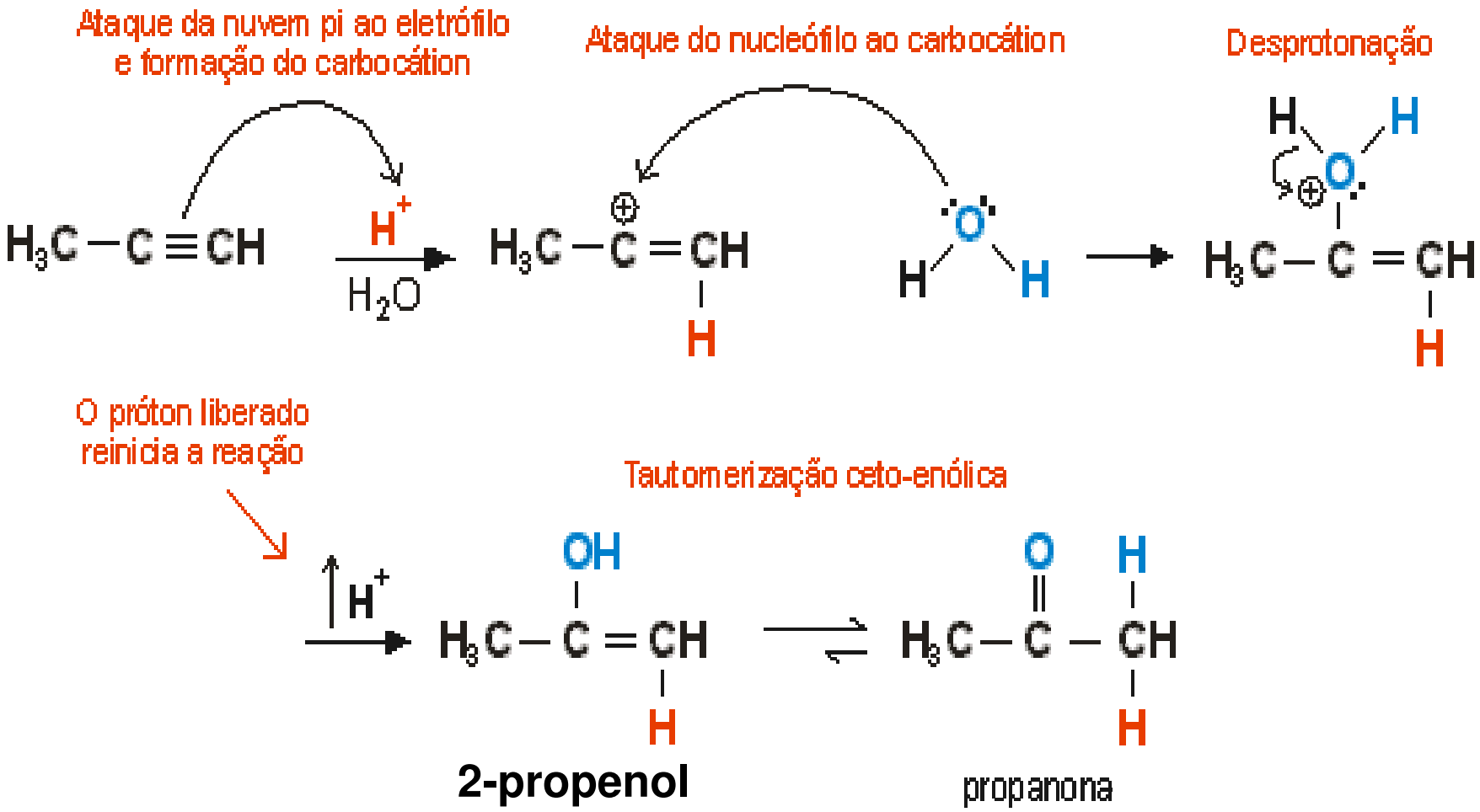
$$CH \equiv CH + HCl \longrightarrow CH_2 = CHCl$$

etino — cloreto de vinila

$$n\ (CH_2 = CHCl) \longrightarrow (\ CH_2 - CHCl)_n$$

Poli(cloreto de vinila)
(PVC)

HIDRATAÇÃO DE ALCINOS



OBS: Alcenos tambem reagem com água da mesma maneira

ISOMERIA

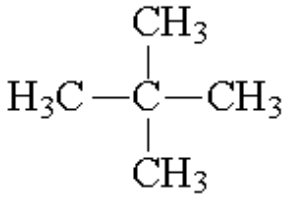
ESTRUTURAL OU CONSTITUCIONAL

CADEIA E POSIÇÃO

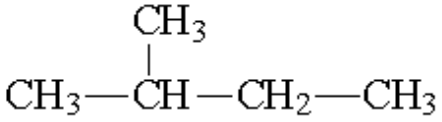
GEOMÉTRICA (ALCENOS E CICLOALCANOS)

ISÔMEROS DE CADEIA

n-pentano



neopentano

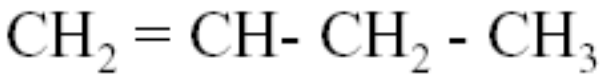


isopentano

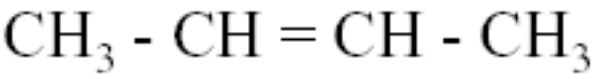
ISÔMEROS de POSIÇÃO

ALCENOS

ALCINOS



1-buteno



2-buteno

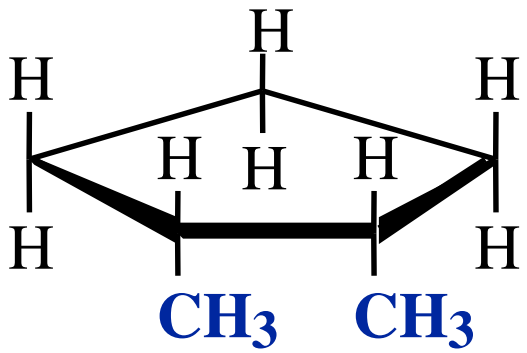
1-butino

2-butino

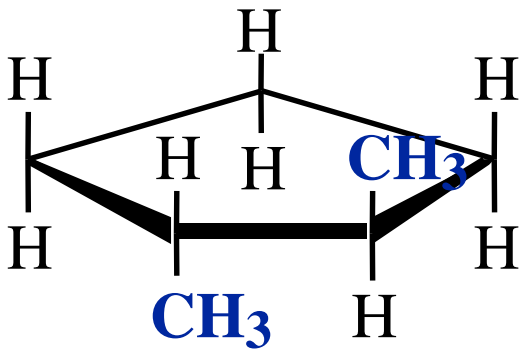
http://www.estg.ipleiria.pt/~c_barros/Quimica_Organica.pdf

Isomeria ***GEOMÉTRICA***

- 1,2-dimetilciclopentano



(Z) ***cis*-1,2-Dimetil-ciclopentano**

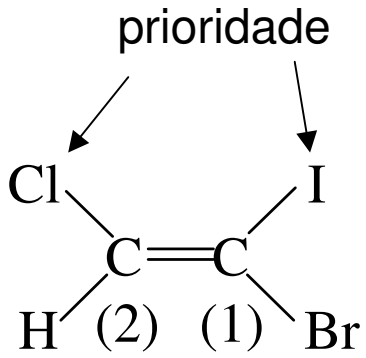


(E) ***trans*-1,2-Dimetil-ciclopentano**

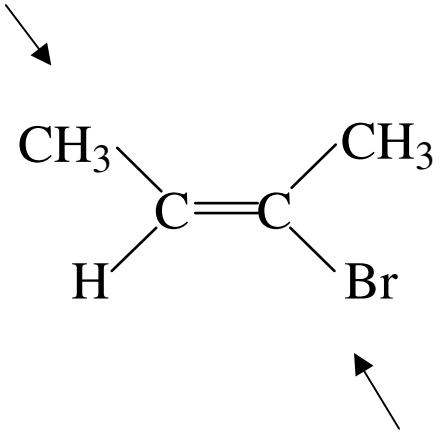
Z- 2-cloro-1-iodociclobutano

Enumera-se o ciclo começando pelo átomo de maior massa molar

Nomeia-se o mesmo por ordem alfabética



Z, Cis- 1-bromo- 2-cloro-1-iodoeteno



E, trans - 2-bromo-2-buteno

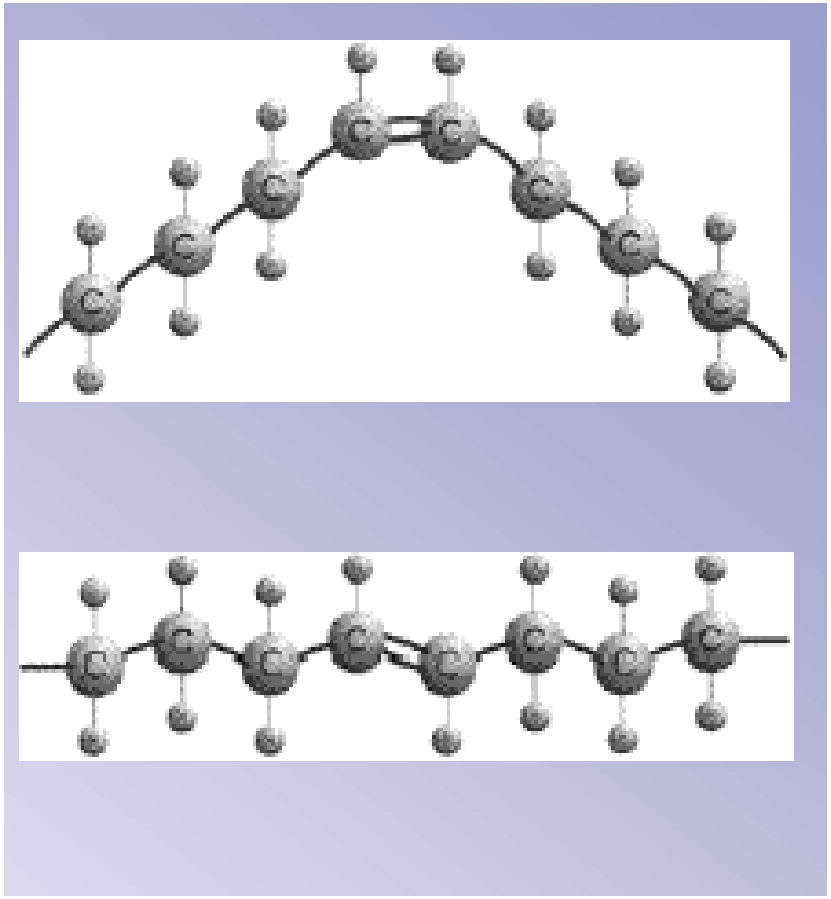
Prioridade grupo de maior massa molar em cada C

ISOMERIA GEOMÉTRICA

ALCENOS

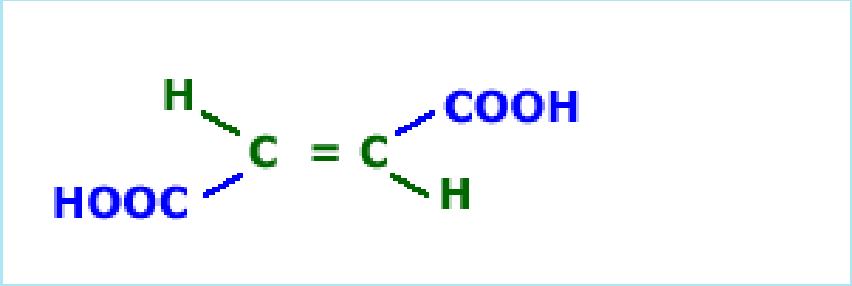
ácidos graxos insaturados estão presentes na *forma cis*, os átomos de hidrogênio estão do mesmo lado da dupla ligação

Nos ácidos graxos *trans*, os dois átomos de hidrogênio estão de lados opostos da dupla ligação.



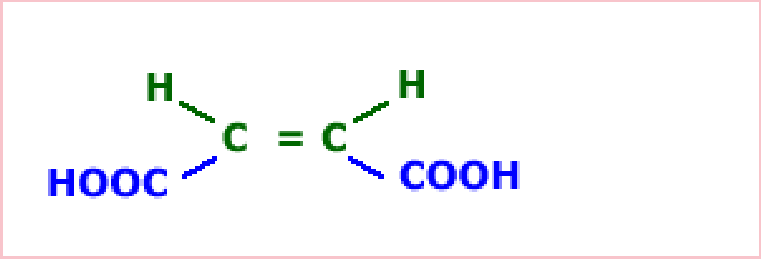
ÁCIDOS GRAXOS INSATURADOS

O ácido fumárico é o ácido butenodióico na forma trans



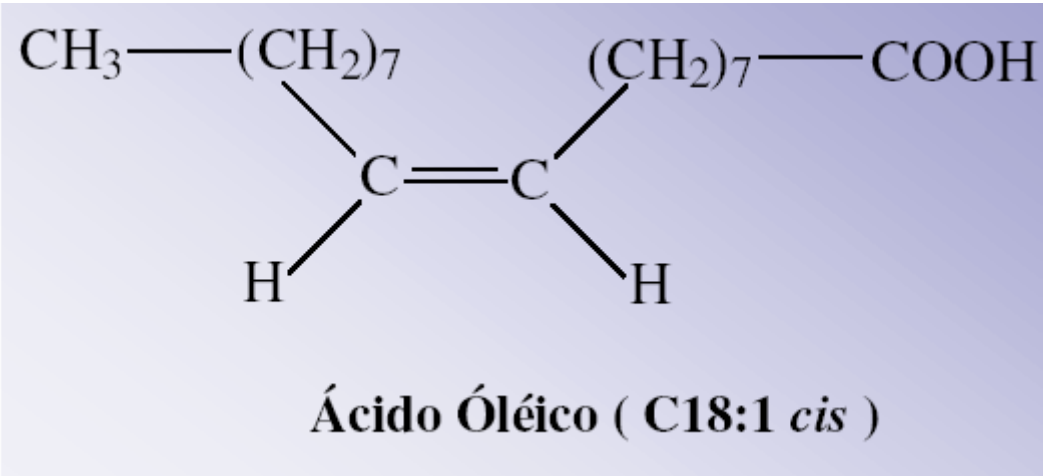
pf= 289 ^{0}C pe menor que o cis

O ácido butenodióico na forma cis é denominado ácido maleico

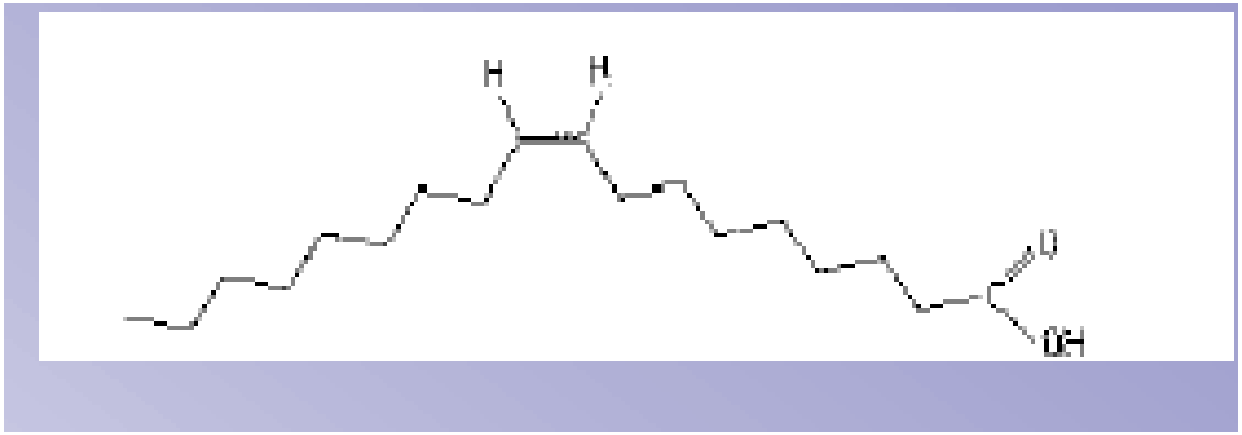


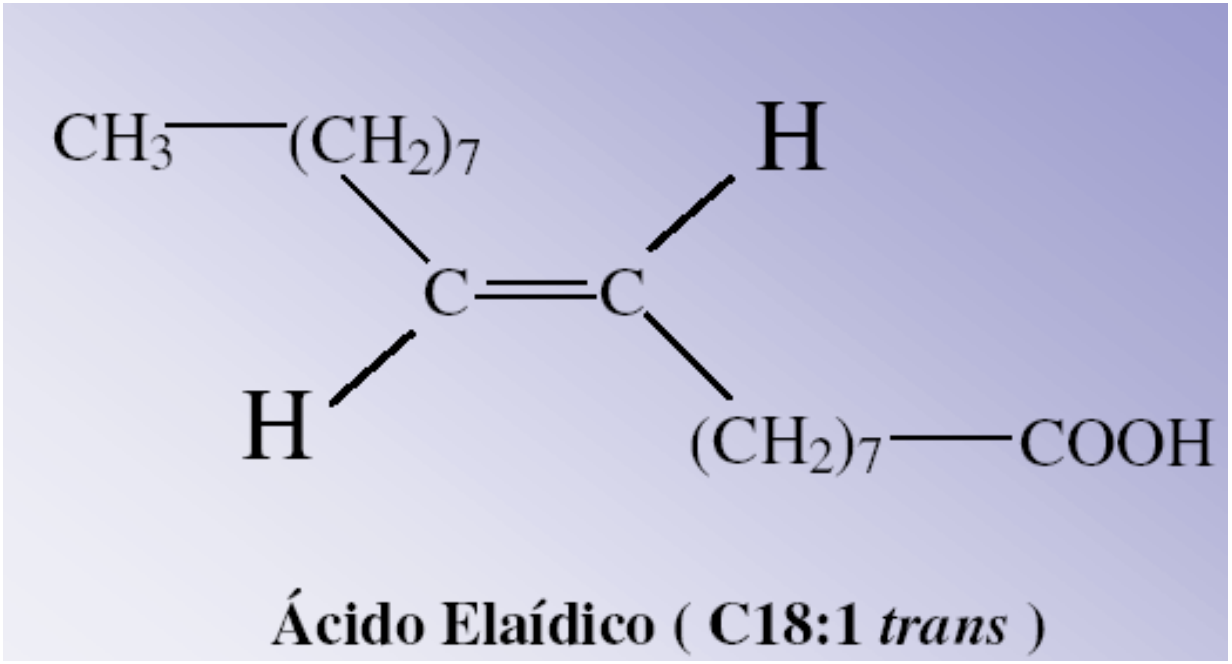
pf= 130 ^{0}C pe maior que o trans

GORDURA TRANS

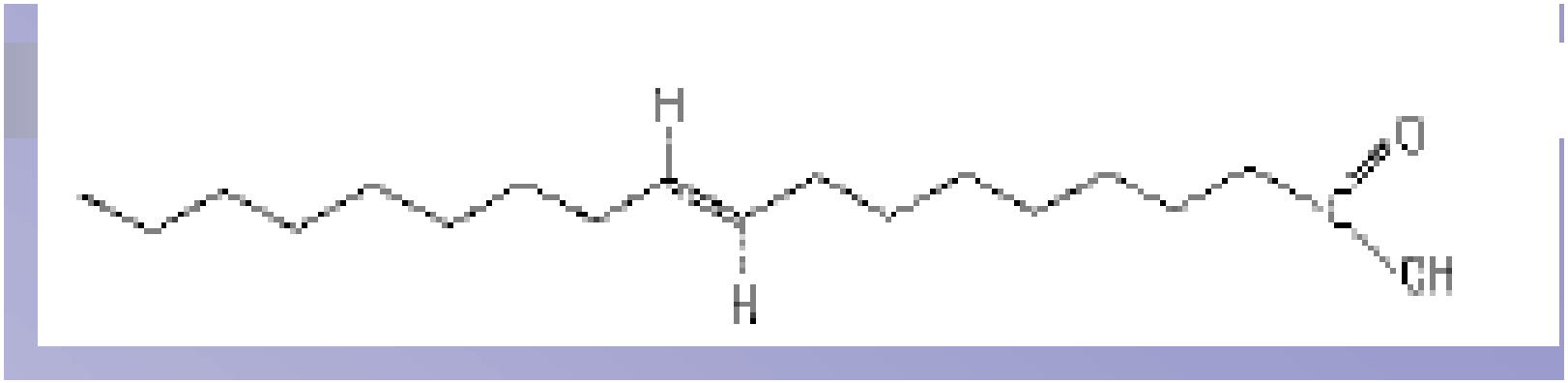


Ácido Óléico (C18:1 *cis*)



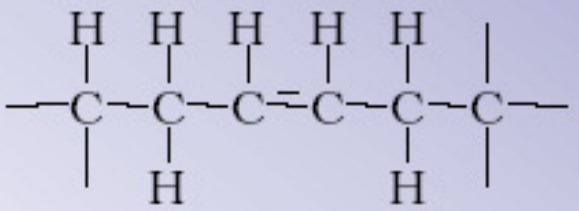


Ácido Elaídico (C18:1 *trans*)



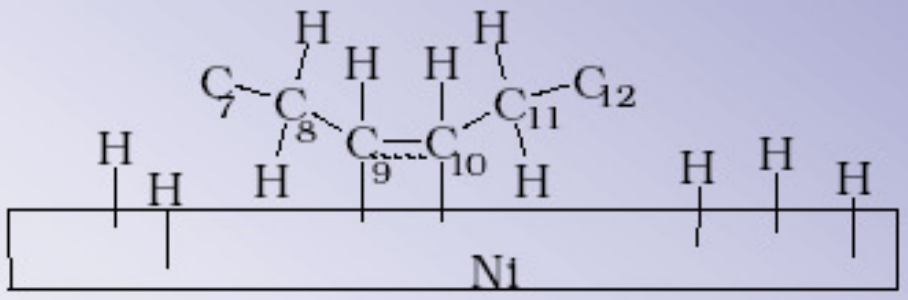
HIDROGENAÇÃO E GORDURA TRANS

Mecanismo de Hidrogenação



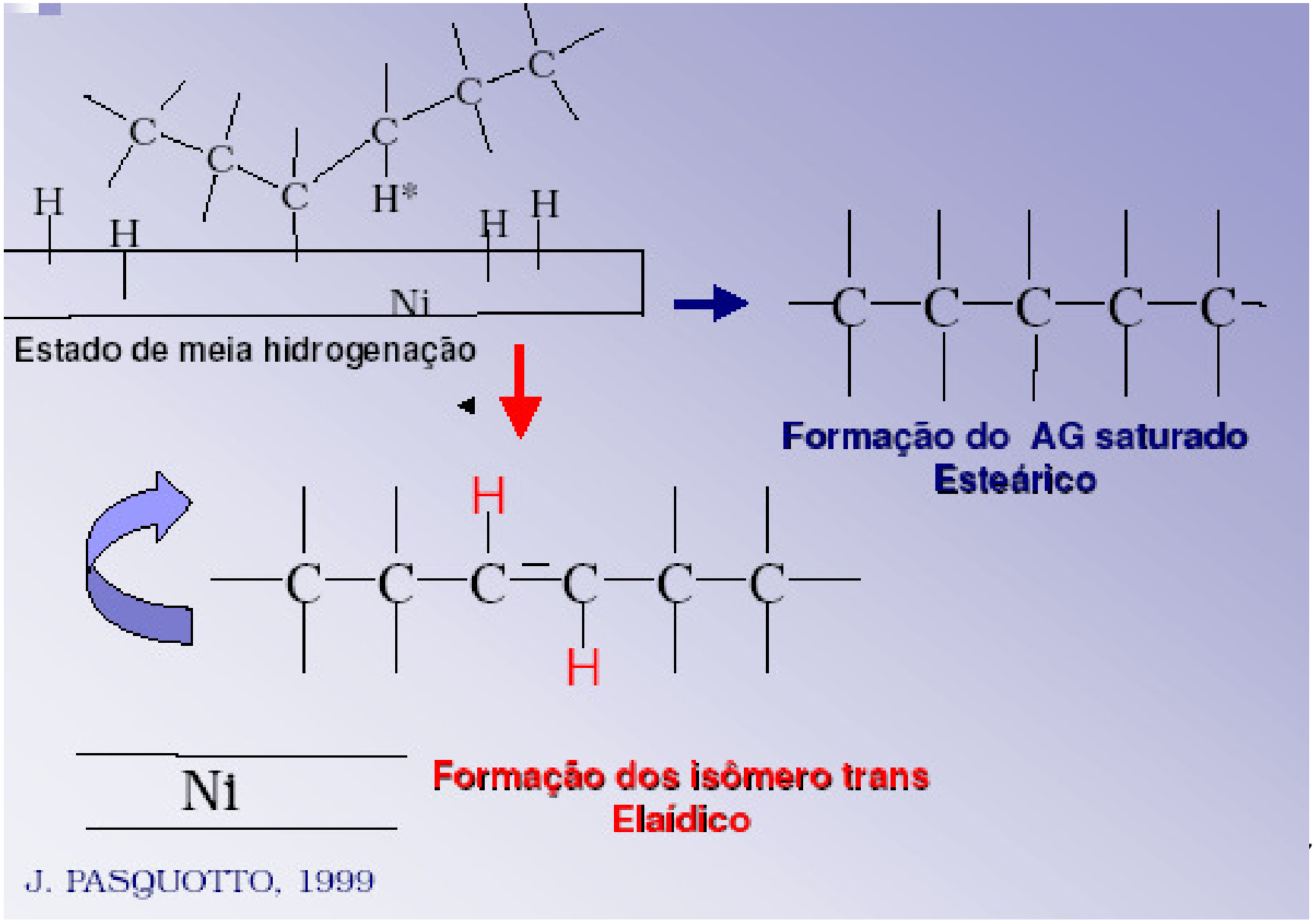
Ácido oléico

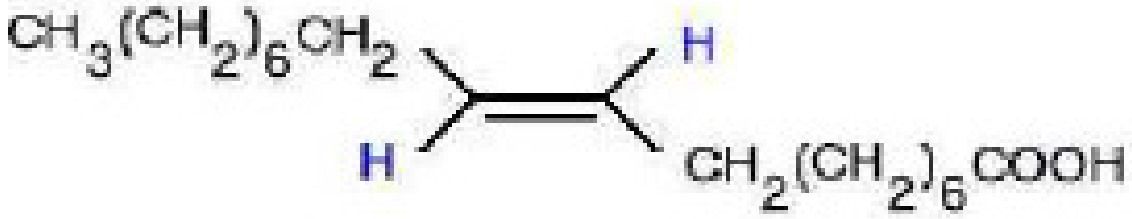
• Ni



Complexo Níquel – ácido graxo

J. PASQUOTTO, 1999

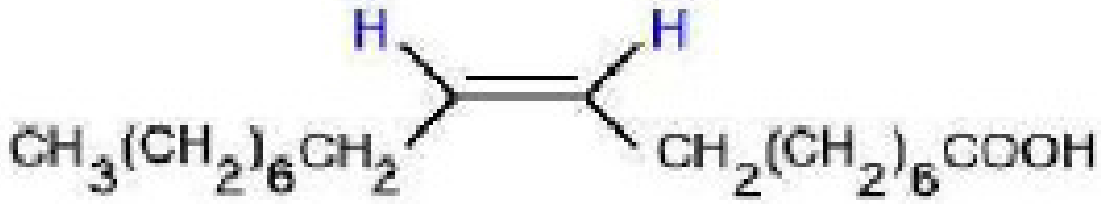

Estado de meia hidrogenação
Formação do AG saturado
Esteárico
Ni
Formação dos isômero trans
Elaídico
J. PASQUOTTO, 1999



Ácido elaidico

C18:1 9 *t*

PF =44ºC



Ácido oléico

C18:1 9 c

PF =13ºC

Ácidos Graxos *Trans*

↑ Ponto fusão

↑ Cristalização β'

↑ Teor de sólidos