

# Revisão das reações orgânicas mais comuns

Baseado em T. W. G. Solomons, G. B. Fryhle *Organic Chemistry* (8th ed.), Wiley, New York, 2004;

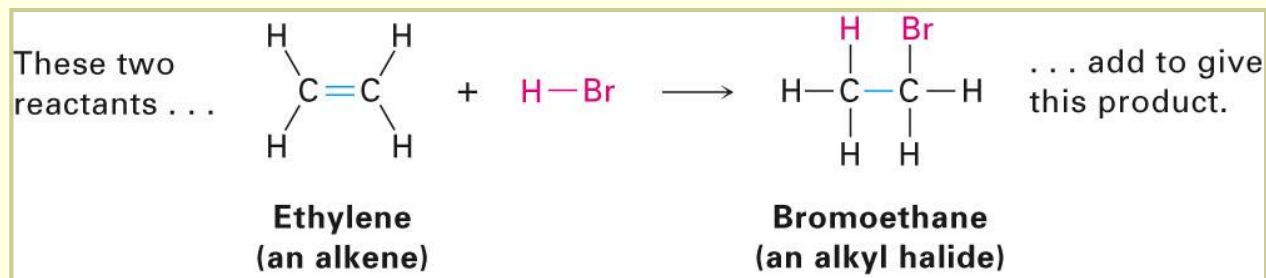
---

A Química Orgânica não se decora, percebe-se!

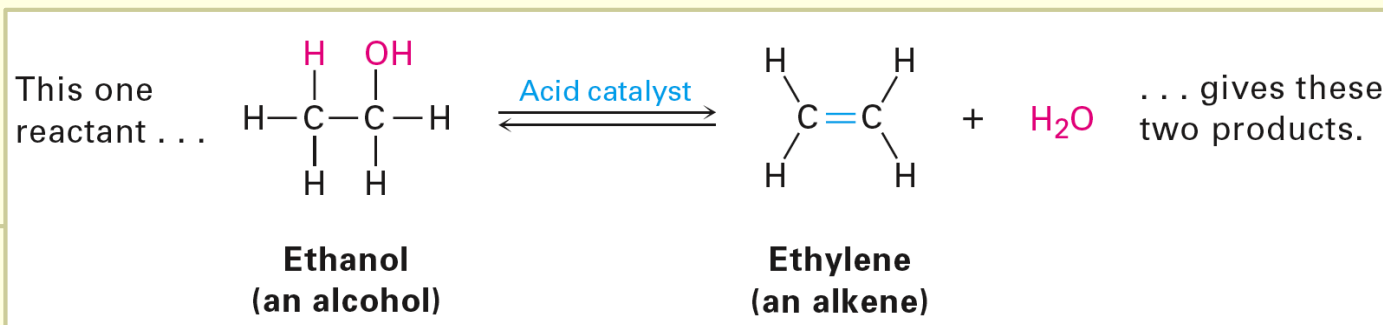
Para perceber Química Orgânica é preciso entender **porque é que as reações ocorrem e como ocorrem.**

# Tipos de reações orgânicas

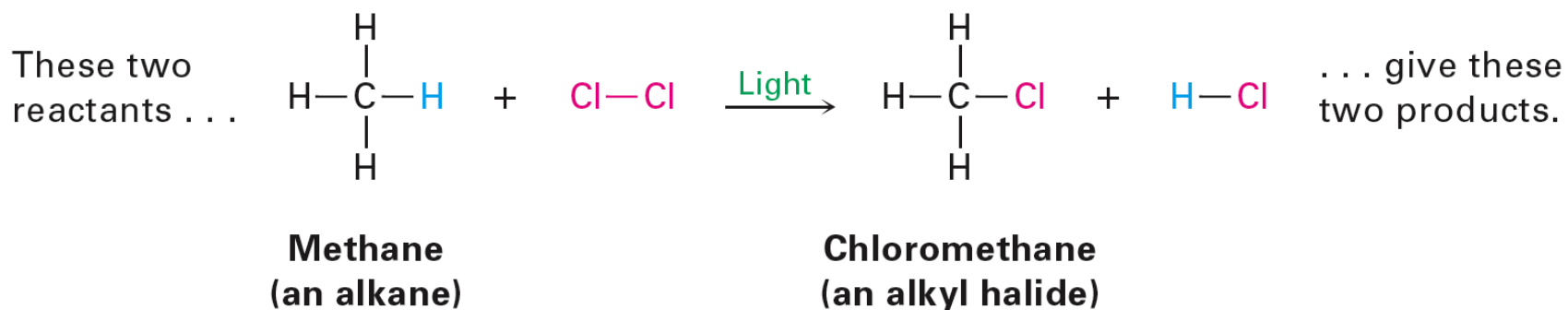
- Existem padrões comuns entre reações do mesmo tipo
  - Reações de adição: combinam-se duas moléculas



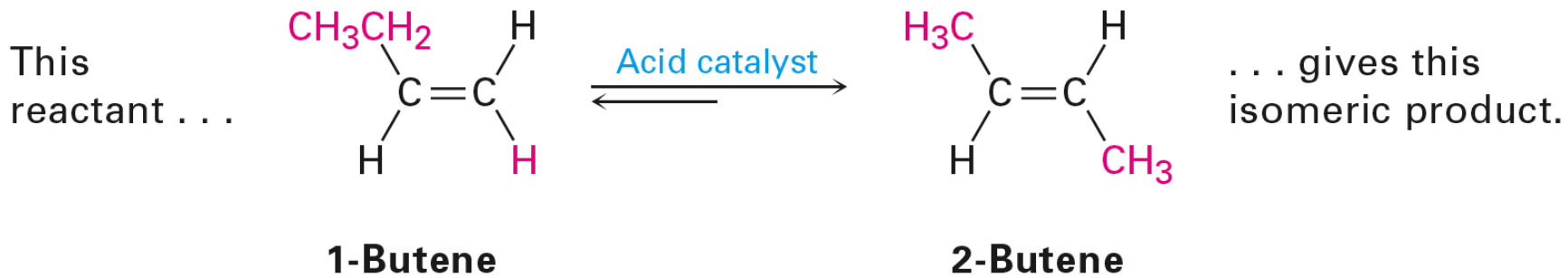
- Reações de eliminação: uma molécula dá origem a duas moléculas



- Reações de substituição: partes de duas moléculas trocam de posição.



- Rearranjos: uma molécula sofre variação no modo como os átomos estão ligados.



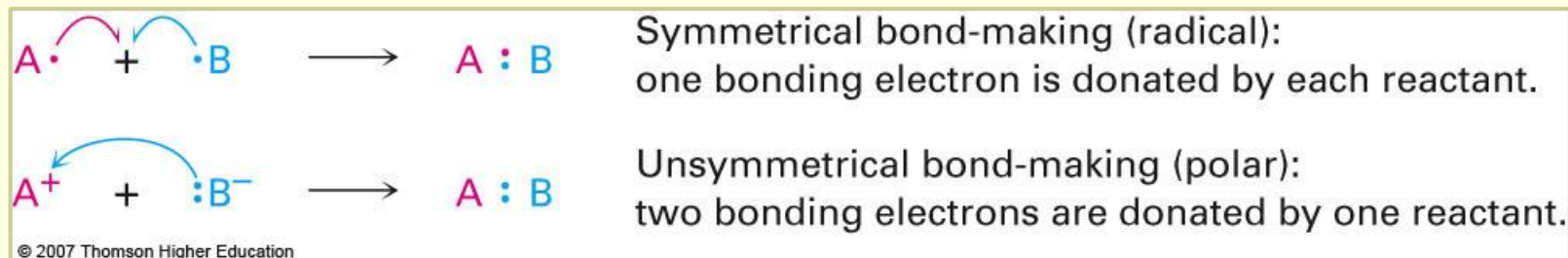
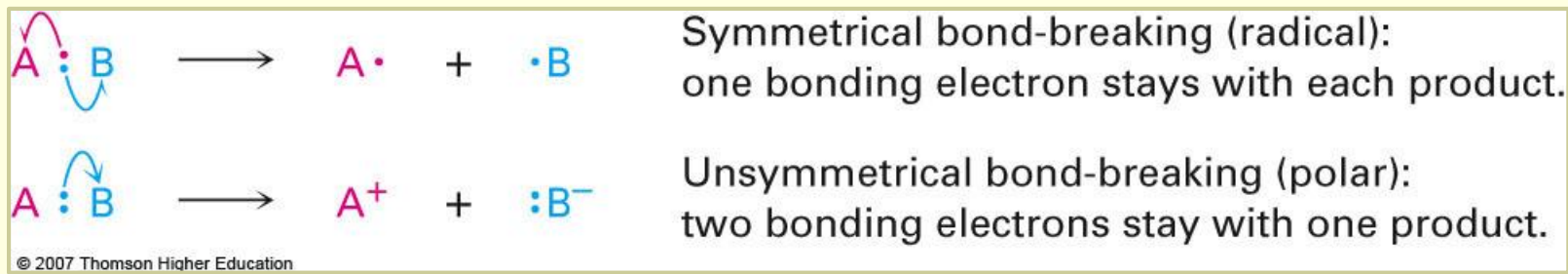
# Como ocorrem as reações orgânicas?

---

- O mecanismo de uma reação descreve as etapas por trás das variações que podemos observar;
- As reações decorrem em etapas definidas que conduzem dos reagentes aos produtos;
- Uma etapa envolve a formação ou a quebra de uma ligação covalente;
- As etapas podem ocorrer isoladas ou em combinação com outras etapas;
- Quando várias etapas ocorrem ao mesmo tempo dizem-se concertadas;

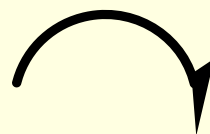
# Tipos de etapas numa reação orgânica

- A formação ou quebra de uma ligação covalente pode ser simétrica ou assimétrica
- **Simétrica-** homolítica
- **Assimétrica-** heterolítica

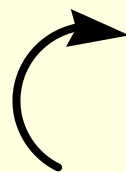


- As setas curvas indicam a quebra e/ ou formação de uma ligação.

- Reação homolítica



- Reação heterolítica

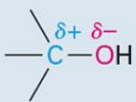
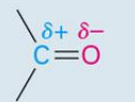

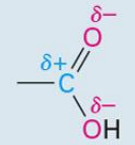
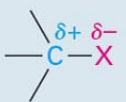
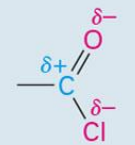
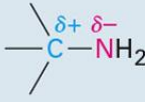
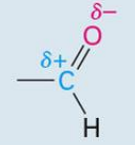




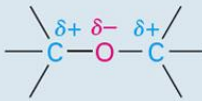
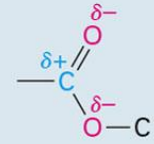
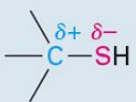
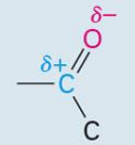
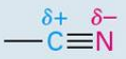

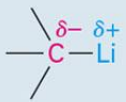
# Reações heterolíticas (polares)

- As moléculas podem conter distribuições eletrónicas locais assimétricas devido a diferenças de eletronegatividade.
- Isto induz uma densidade de carga negativa parcial num determinado átomo, compensada por uma carga parcial positiva no átomo adjacente.
- O átomo mais eletronegativo vai concentrar a maior densidade de carga parcial negativa.
- Elementos como O, F, N, Cl são mais eletronegativos do que o carbono.

**Table 5.1 Polarity Patterns in Some Common Functional Groups**

Alcohol		Carbonyl	
Alkene		Carboxylic acid	
Alkyl halide		Carboxylic acid chloride	
Amine		Aldehyde	

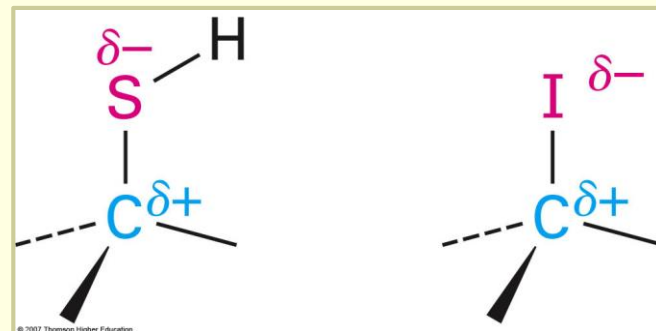
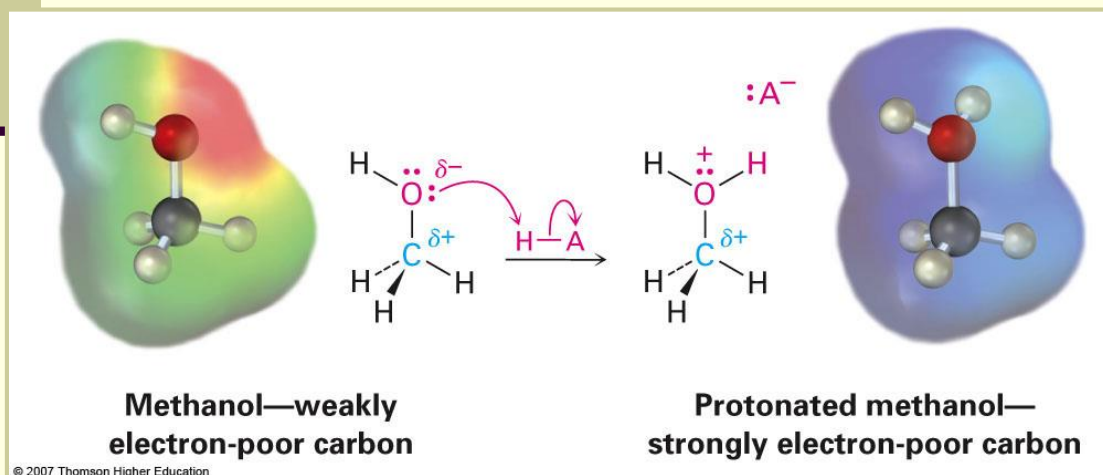
© 2007 Thomson Higher Education

Ether		Ester	
Thiol		Ketone	
Nitrile			
Grignard reagent			
Alkyl lithium			

© 2007 Thomson Higher Education

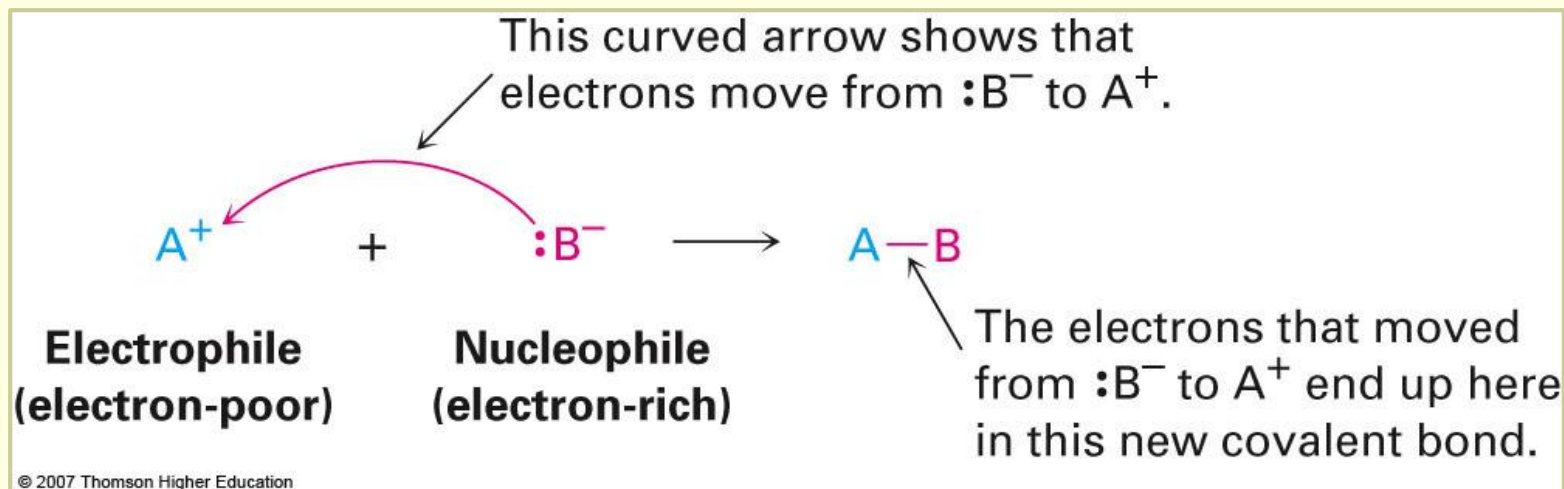
# Polarizabilidade

- **Polarização** é uma variação na distribuição eletrônica, como resultado da variação da natureza eletrônica do meio.
- As reações polares ocorrem entre regiões de alta densidade eletrônica e regiões de baixa densidade eletrônica.

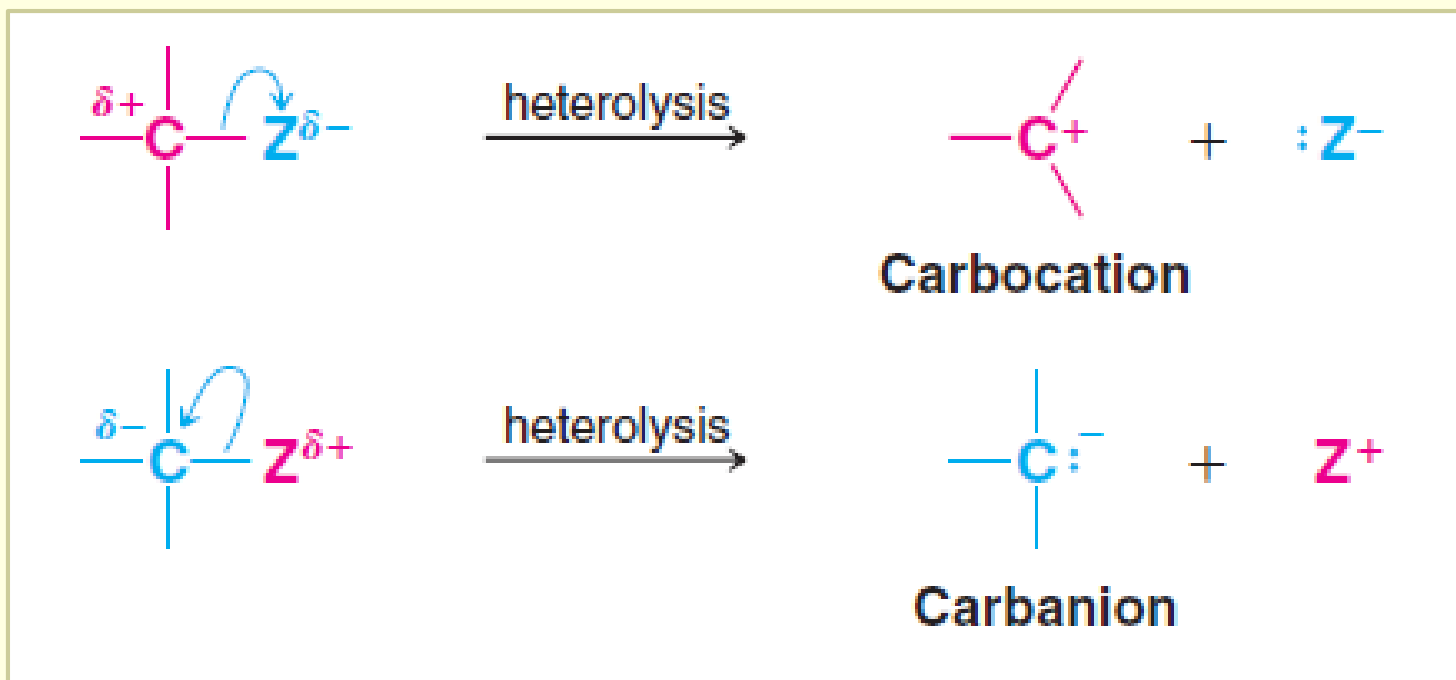


# Princípios da reações orgânicas

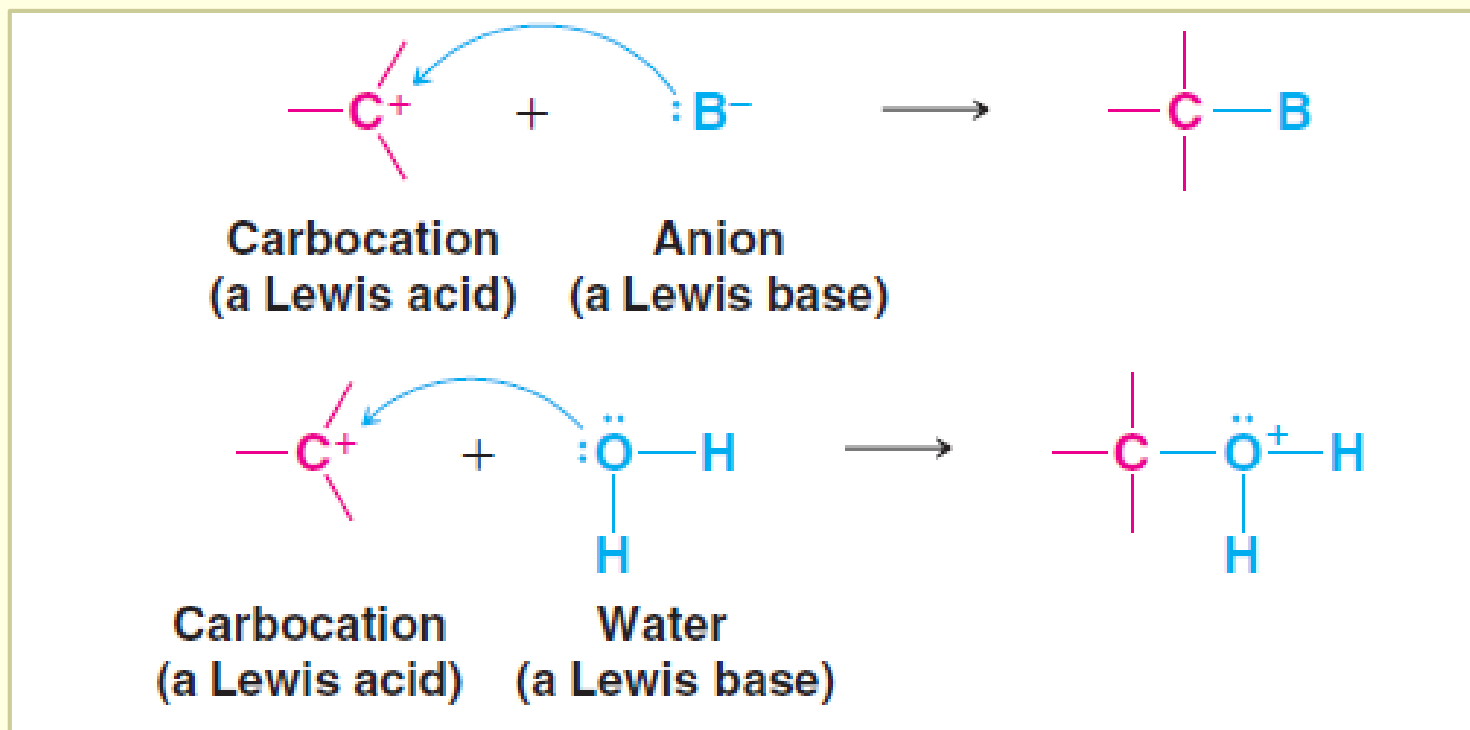
- Um **eletrófilo**- uma espécie pobre em elétrons- combina-se com um **nucleófilo**, uma espécie rica em elétrons.
- Um **eletrófilo** é um ácido de Lewis
- Um **nucleófilo** é uma base de Lewis
- Esta combinação é indicada com uma seta curva que vai do nucleófilo para o eletrófilo.



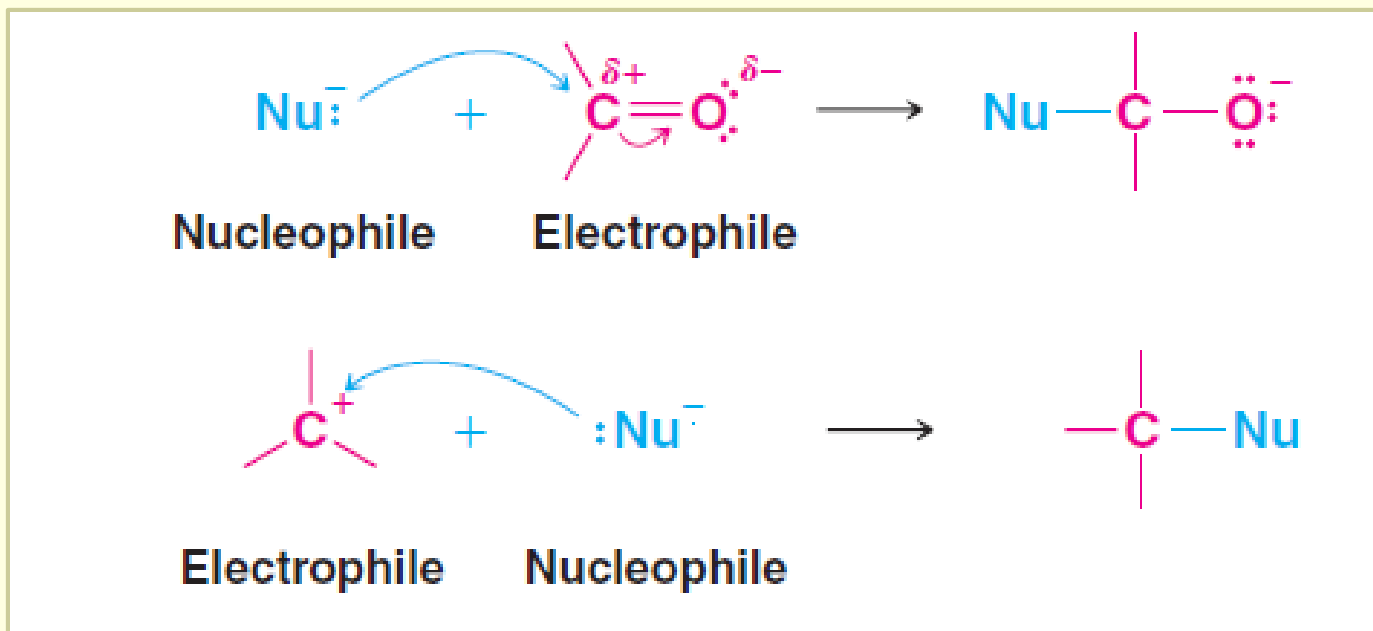
# Heterólise de ligações ao carbono



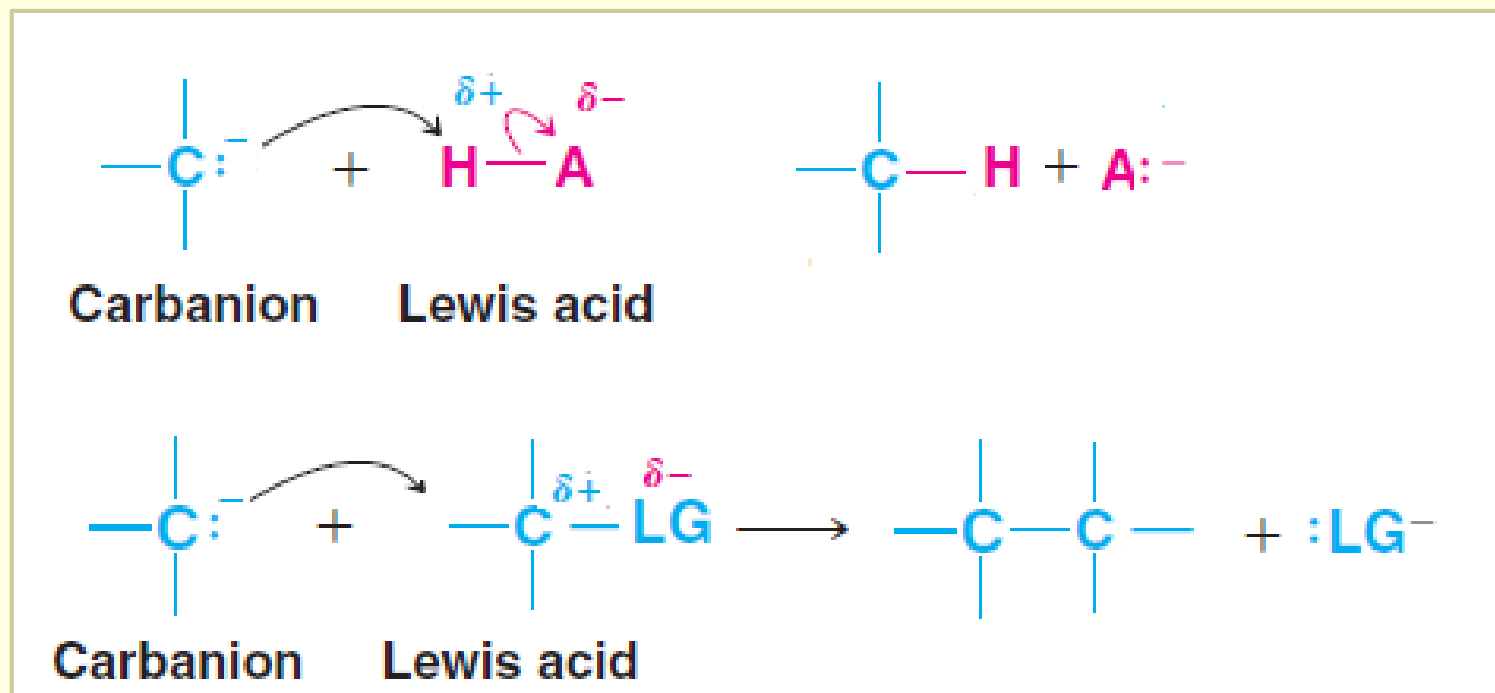
# Os carbocatiões reagem com bases de Lewis neutras ou carregadas



O carbono do carbonilo **não é um carbocatião**, mas é um eletrófilo.



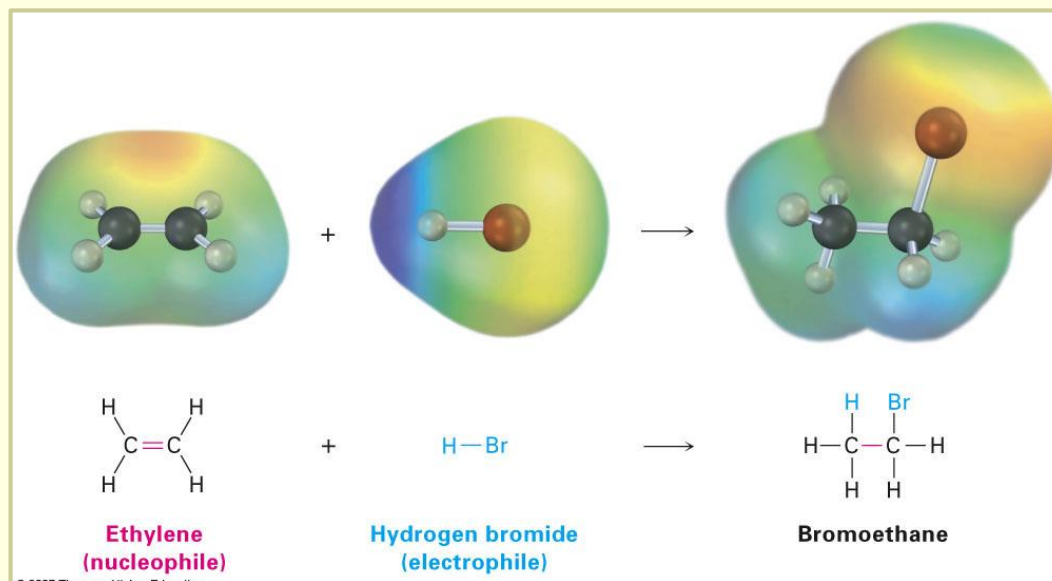
Os carbaniões são bases de Lewis e comportam-se como nucleófilos.





# Exemplo de uma reação polar: adição de HBr ao eteno

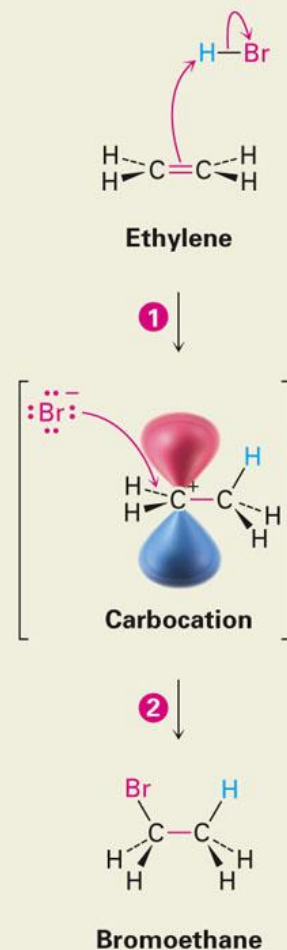
- HBr adiciona-se à parte  $\pi$  da ligação dupla C-C;
- A ligação  $\pi$  é rica em elétrons, fazendo com que funcione como nucleófilo;
- H-Br está eletrodeficiente no átomo de hidrogénio uma vez que o bromo é muito eletronegativo.



# Mecanismo completo

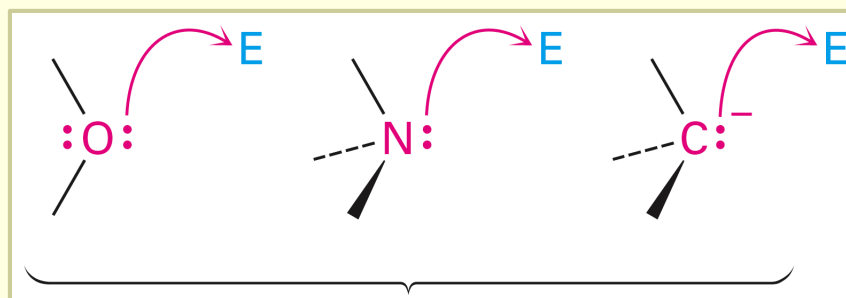
**1** A hydrogen atom on the electrophile HBr is attacked by  $\pi$  electrons from the nucleophilic double bond, forming a new C-H bond. This leaves the other carbon atom with a + charge and a vacant  $p$  orbital. Simultaneously, two electrons from the H-Br bond move onto bromine, giving bromide anion.

**2** Bromide ion donates an electron pair to the positively charged carbon atom, forming a C-Br bond and yielding the neutral addition product.

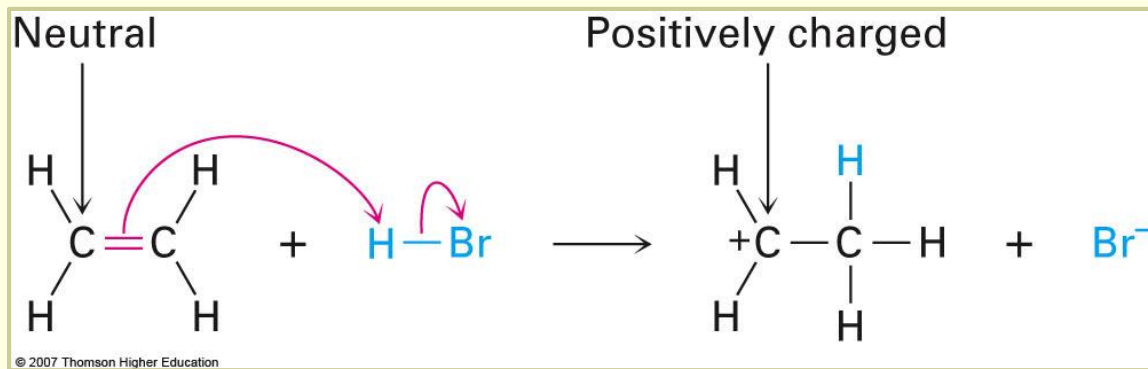
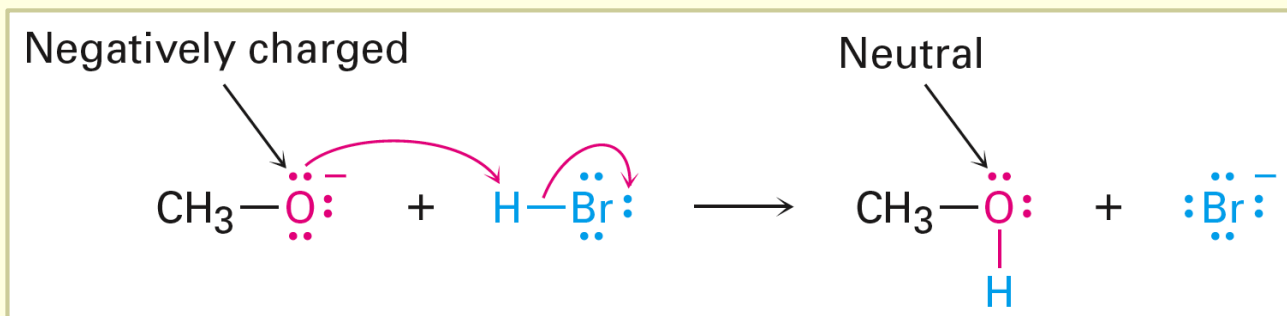


# As setas nas reações polares

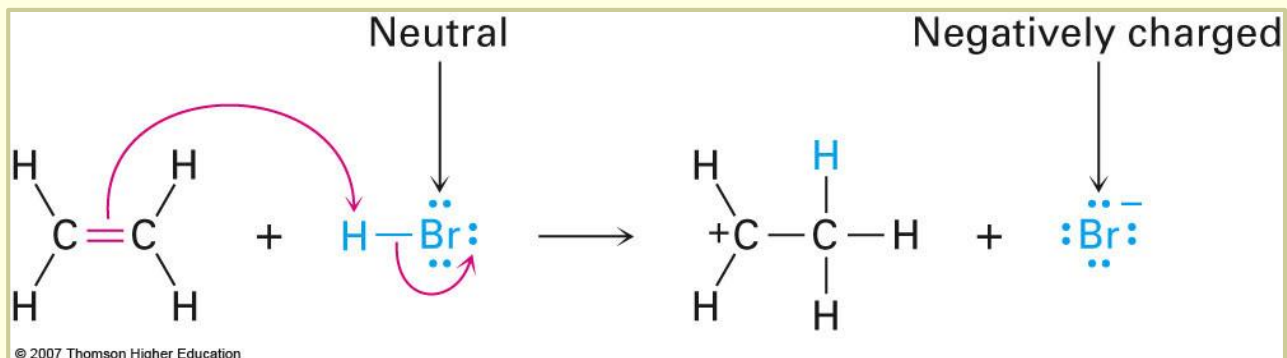
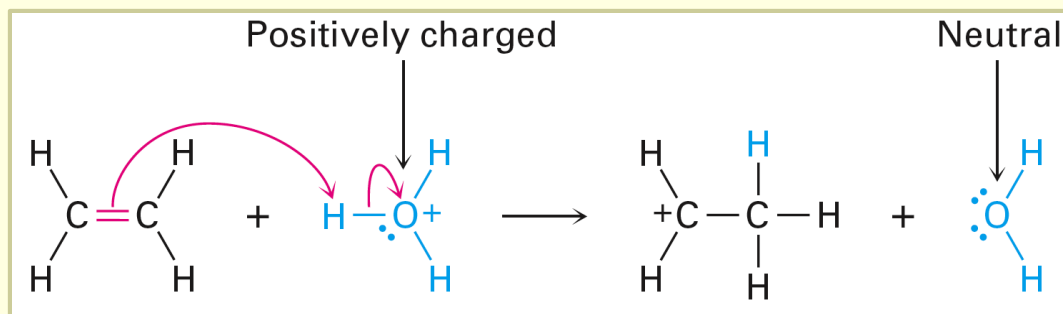
- As setas indicam “movimentos eletrônicos”;
- As cargas variam durante uma reação;
- Uma seta curva corresponde a uma etapa do mecanismo reacional;
- A seta vai do nucleófilo para o eletrófilo.

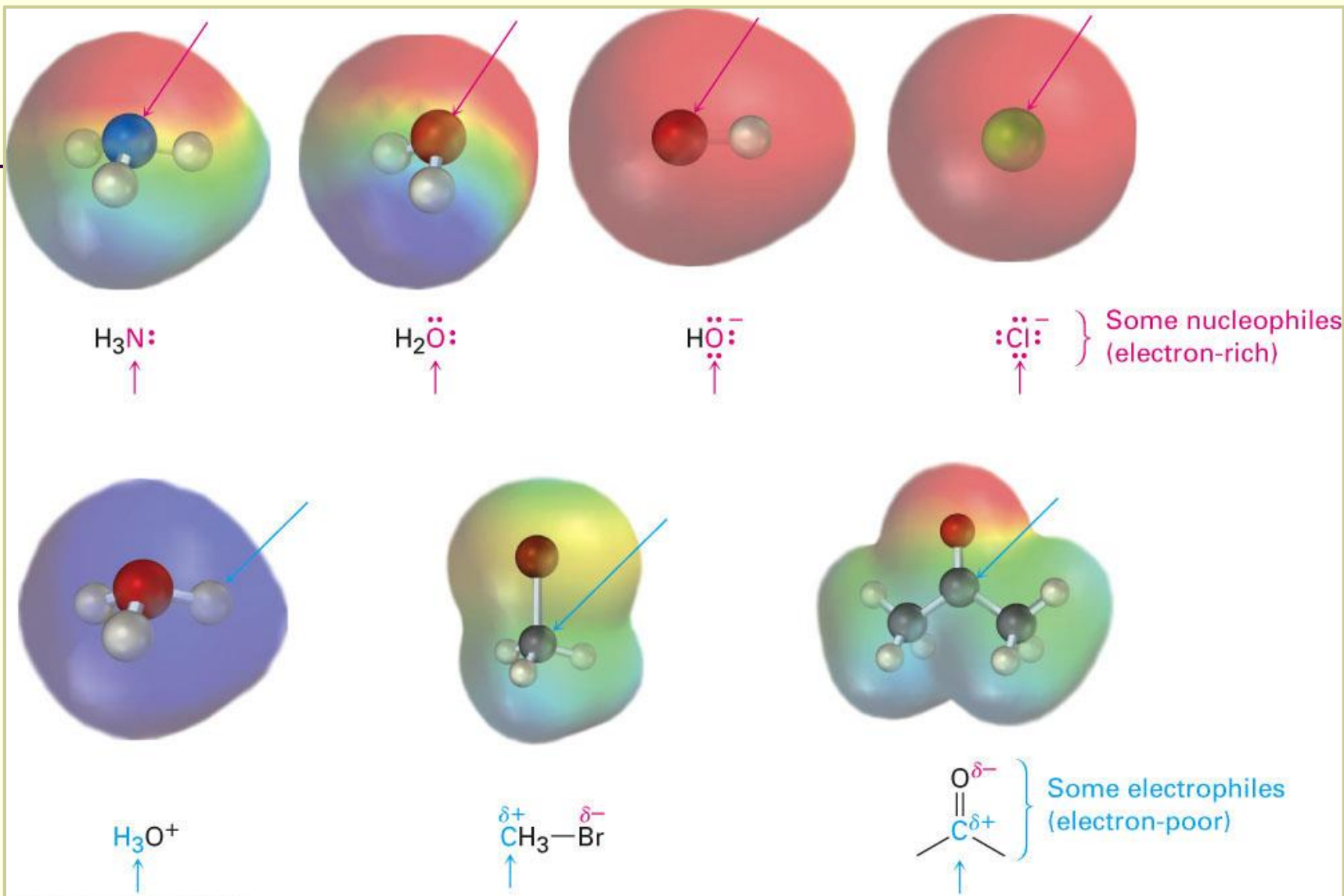


- O nucleófilo pode ser neutro ou negativo.




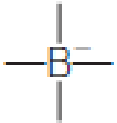



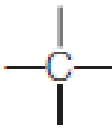
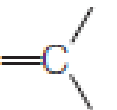




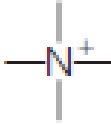









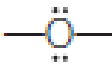




# ■ O eletrófilo pode ser neutro ou positivo





A regra do octeto tem que ser seguida, exepcto no caso do hidrogénio.

TABLE 1.3 A Summary of Formal Charges

Group	Formal Charge of +1	Formal Charge of 0	Formal Charge of -1
IIIA			
IVA	  	  	  
VA	  	  	 
VIA	 	 	
VIIA		 (X = F, Cl, Br, or I)	