



Universidade Federal de Ouro Preto

# **Ressonância, Formas de representação de moléculas orgânicas, Forças intermoleculares**

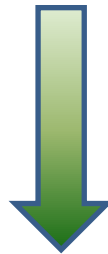
## **Aula 3**

**Flaviane Francisco Hilário**

# 1 – Ressonância

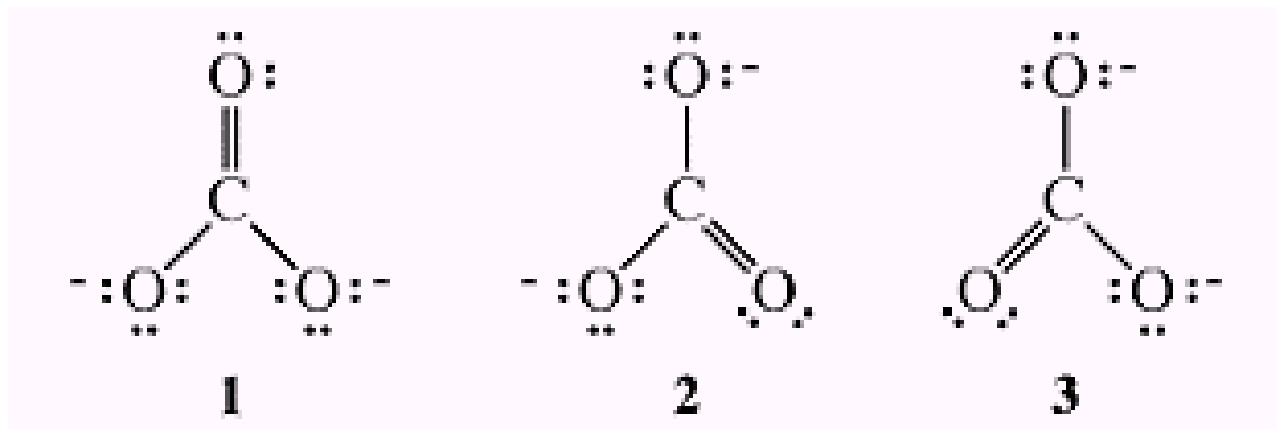
## ESTRUTURA DE LEWIS

Explica de maneira satisfatória a conectividade dos átomos

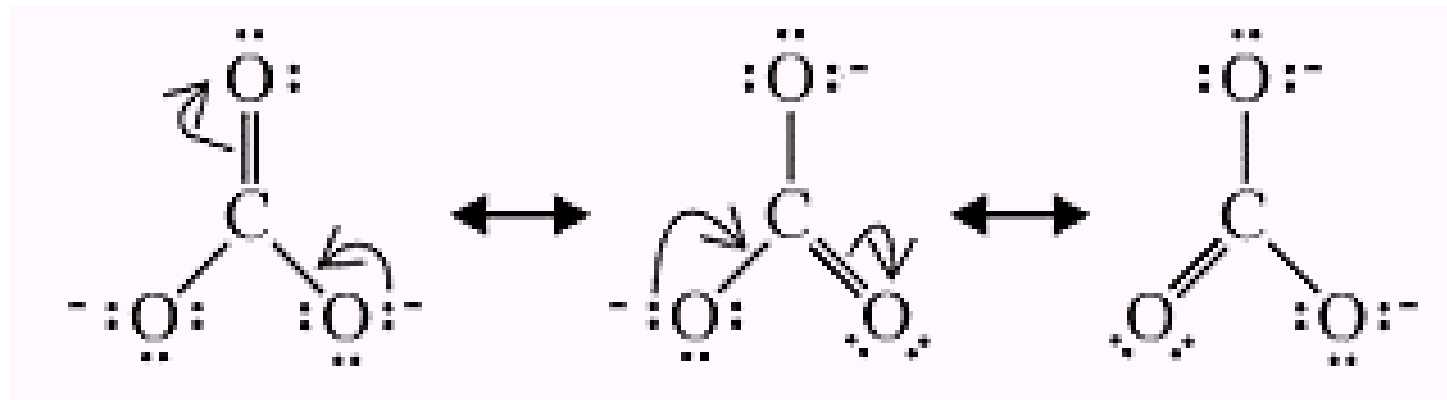


Impõe aos elétrons uma localização

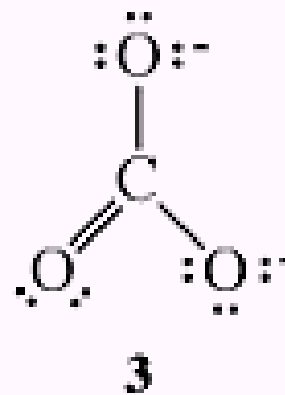
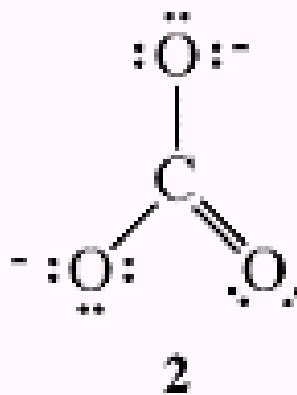
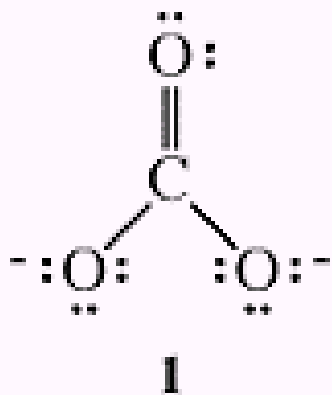
Íon carbonato ( $\text{CO}_3^{2-}$ )  $\rightarrow$  3 estruturas de Lewis **equivalentes**.



Interconversão pela simples TRANSFERÊNCIA DE ELÉTRONS.



# Íon carbonato ( $\text{CO}_3^{2-}$ )



## Dados conhecidos

- **Dados de raios X**

Todas as ligações no íon carbonato têm o mesmo comprimento.

- **Dados teóricos**

As densidades de carga são iguais nos átomos de oxigênio.

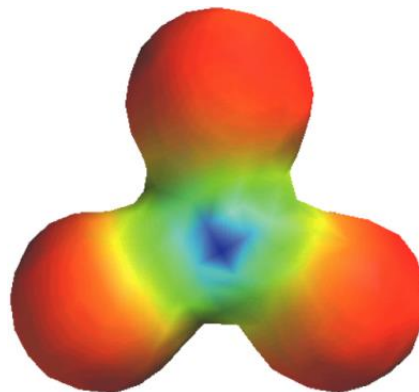
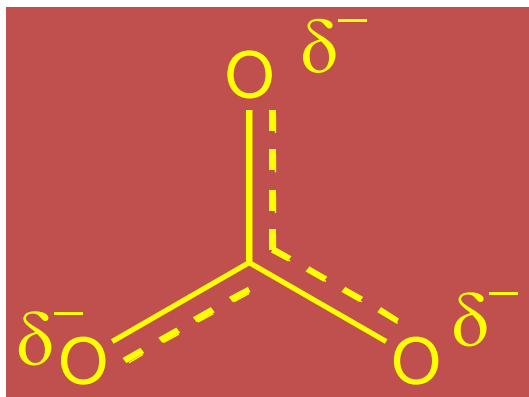
## Teoria da ressonância

Sempre que uma molécula ou um íon puderem ser representados por duas ou mais estruturas de Lewis, cuja única diferença é a posição dos elétrons, teremos:

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

2 – A molécula ou íon será melhor representado por um *híbrido de ressonância*.

## O que podemos falar do *híbrido de ressonância*?



Híbrido de ressonância do íon carbonato

Ligação simples C-O: 1,43 Å

Ligação dupla C=O: 1,20 Å

Ligação medida: 1,28 Å

1 – O comprimento das ligações C—O são iguais e são intermediárias entre uma dupla e uma simples.

2 – As densidades de carga são iguais em cada oxigênio.

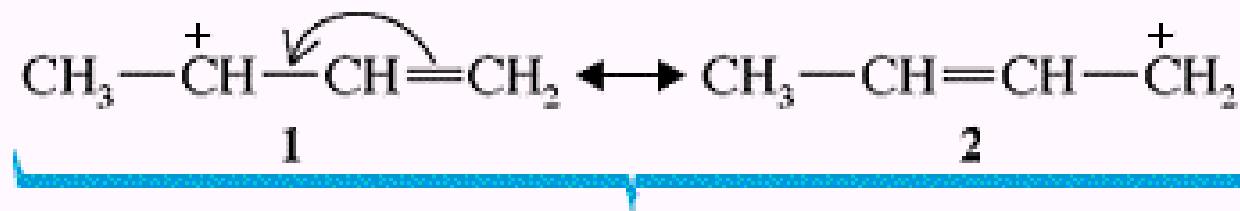
# Regras de Ressonância

1 - Estruturas de ressonância só existem no papel.

- Escrevemos as estruturas de ressonância e “conectamos” por uma seta dupla  $\leftrightarrow$ .
- A molécula real será um híbrido de todas elas.

2 - Ao escrever estruturas de ressonância, podemos mover apenas os elétrons.

- A posição dos núcleos dos átomos deve continuar a mesma em todas as estruturas.

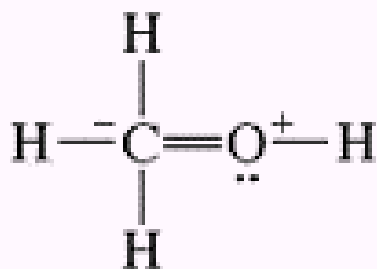


**Estruturas de ressonância**



3 - Todas as estruturas de ressonância devem ser estruturas de Lewis apropriadas.

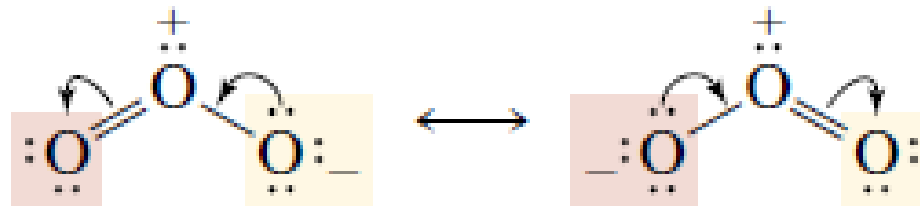
- Por exemplo: NÃO devemos escrever estruturas nas quais o carbono possua cinco ligações.



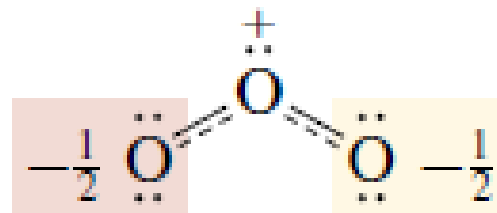
**INCORRETO! O  
carbono NÃO pode  
fazer cinco  
ligações!!!**

4 - O híbrido de ressonância (molécula real) tem energia menor do que qualquer uma das estruturas de ressonância desenhadas.

Exemplo: ozônio ( $O_3$ ).



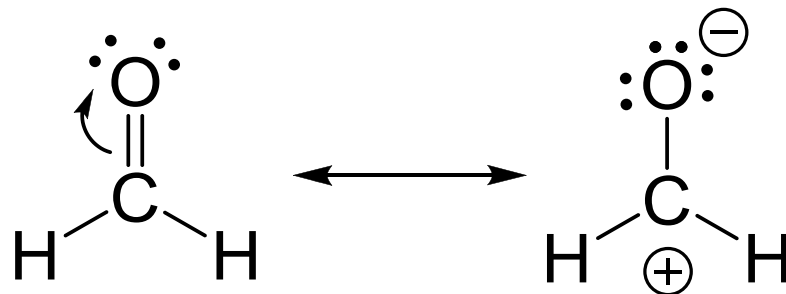
Estruturas de ressonância



Híbrido de ressonância

5 - Quanto mais estável uma estrutura de ressonância (quando analisada isoladamente), maior é a contribuição para o híbrido.

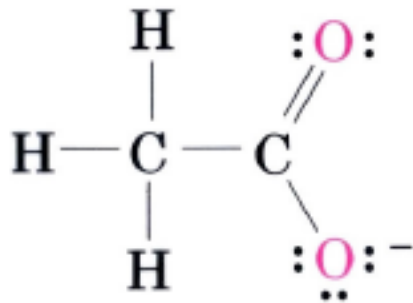
- Quanto mais ligações covalentes uma estrutura tem, mais estável ela é.
- As estruturas nas quais todos os átomos têm um nível de valência completo são especialmente estáveis e contribuem muito para o híbrido.
- A separação de cargas diminui a estabilidade.



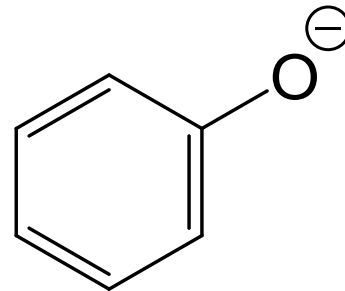
Estruturas de ressonância para o formaldeído

- d. Os contribuintes de ressonância com carga negativa em átomos altamente eletronegativos são mais estáveis do que aqueles com carga negativa em átomos menos eletronegativos ou não-eletronegativos.

EXERCÍCIO: Qual dos dois íons é mais estabilizado por ressonância?

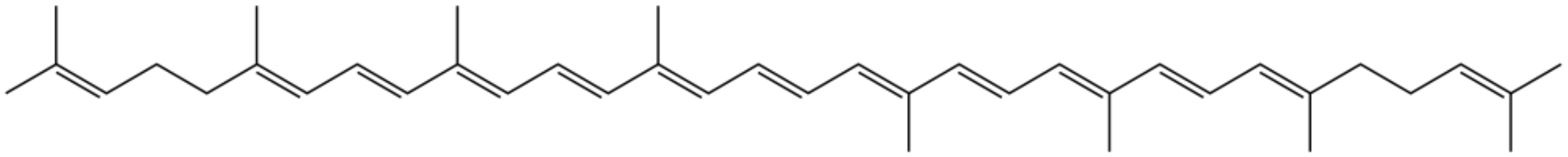


íon acetato



íon fenolato

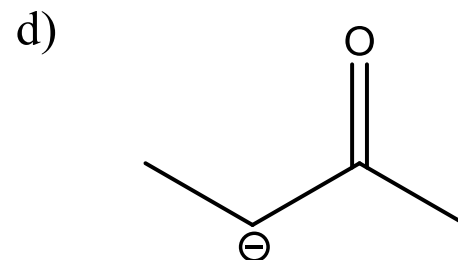
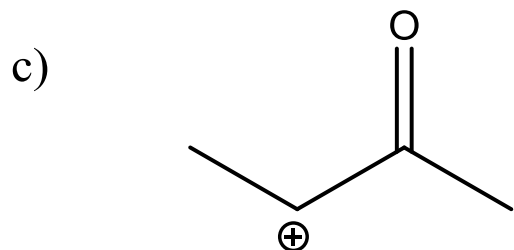
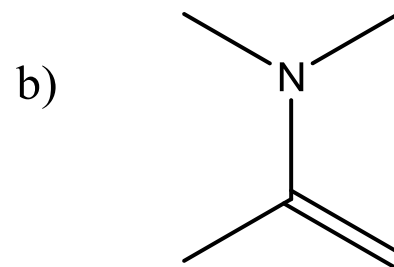
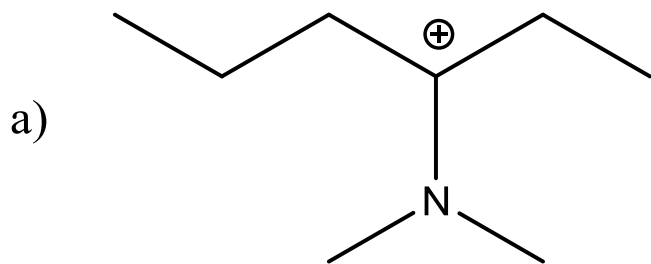
# Exemplo da importância da ressonância



**Licopeno** (presente no  
tomate)

# EXERCÍCIO

Desenhe as estruturas canônicas de ressonância e o híbrido de ressonância para cada um dos compostos abaixo.



# 2 – Formas de representação de moléculas orgânicas

## Fórmula química

- Maneira que os químicos possuem de representar a constituição das moléculas.

### 2.1 - Fórmula empírica

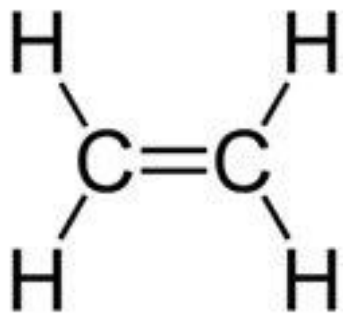
- Indica o tipo de átomos que formam uma molécula e a proporção em que se encontram.

Ex.:  $\text{CH}_2$     $\text{CH}_3$     $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$

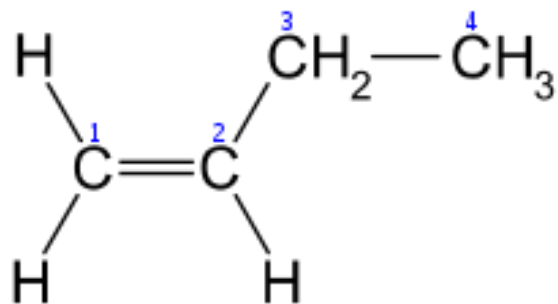
## 2.2 - Fórmula molecular

- Indica o tipo e a quantidade de átomos que formam uma molécula. (Não indica a maneira pela qual os átomos estão ligados, nem a disposição desses no espaço.)

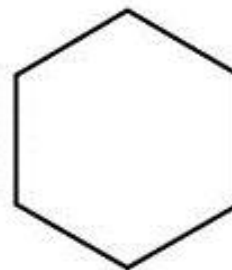
Ex.:  $C_2H_4$        $C_2H_6$        $CH_2O$



Eteno ( $C_2H_4$ )



Buteno ( $C_4H_8$ )

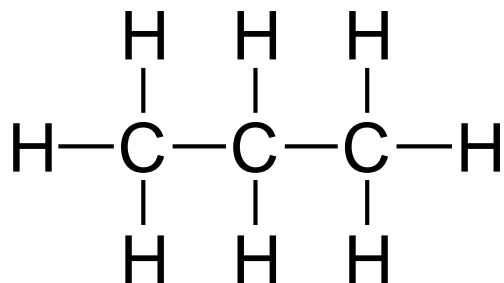


Ciclohexano ( $C_6H_{12}$ )



## 2.3 - Fórmula estrutural

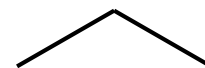
- Fornece a ordem de ligação (conectividade) dos átomos.
- Existem várias maneiras de representar as fórmulas estruturais de compostos orgânicos. Ex.: Para um composto com fórmula molecular  $C_3H_8$



Fórmula de traços

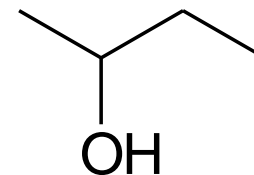
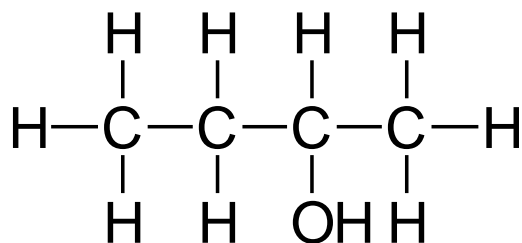


Fórmula condensada

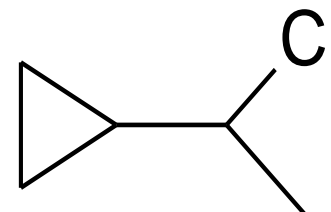
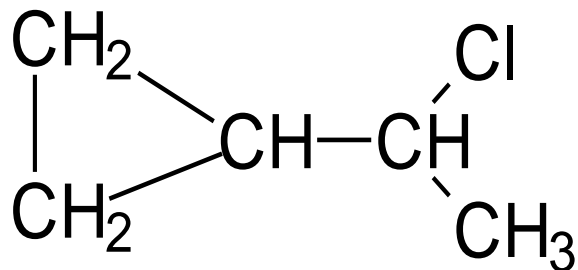


Fórmula de linhas

- Considerando a fórmula molecular  $C_4H_{10}O$ , têm-se as seguintes possibilidades de fórmula estrutural:

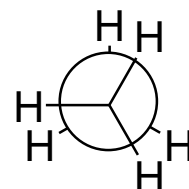
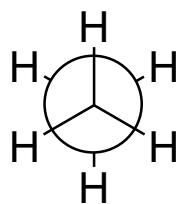
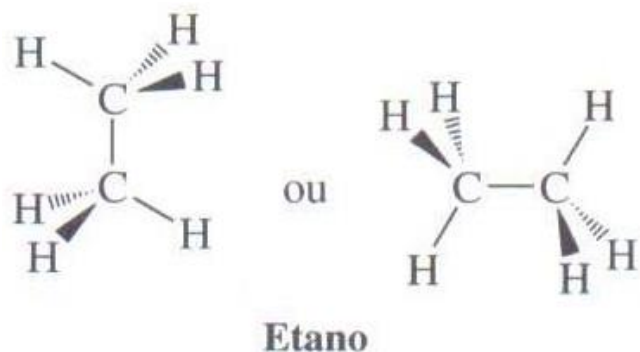


- Compostos cíclicos (fórmula de traços e fórmula de linhas)

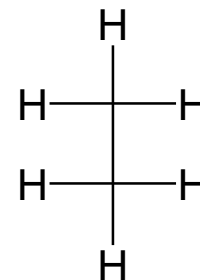


## 2.4 - Fórmulas tridimensionais

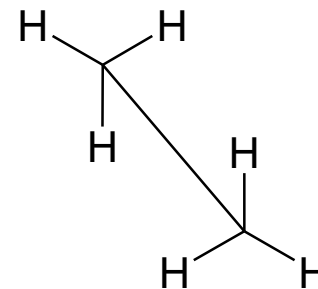
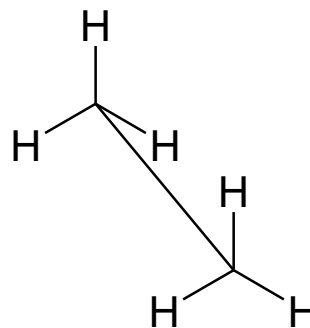
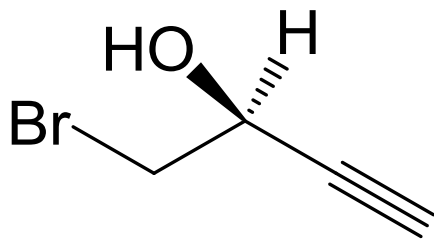
- Fornece informação sobre como os átomos de uma molécula estão arranjados no espaço.



Projeções de Newman



Fischer



Cela ou Cavalete

Outras Fórmulas Tridimensionais para o Etano.

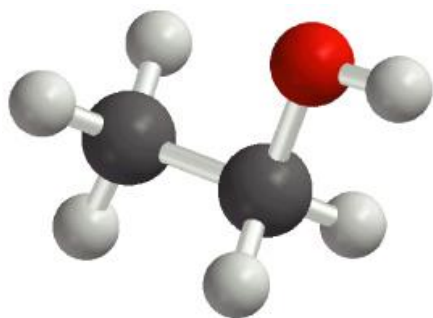
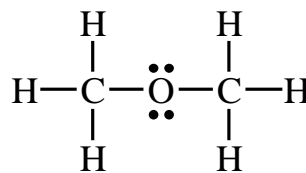
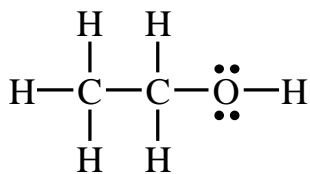
## Isômeros: a importância das fórmulas estruturais

**Isômeros:** compostos diferentes que têm a mesma fórmula molecular.

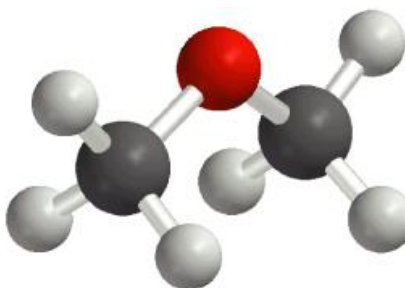
Exemplo: Dois compostos isoméricos com fórmula molecular  $C_2H_6O$

		$C_2H_6O$	$C_2H_6O$
<b>Temperatura ebulição em °C</b>	<b>de</b>	<b>78.5</b>	<b>-24.9</b>
<b>Temperatura fusão °C</b>	<b>de</b>	<b>-117.3</b>	<b>-138</b>
<b>Reação com <math>Na^0</math></b>		<b>Libera <math>H_2</math></b>	<b>Não reage</b>

## Dois compostos diferentes na conectividade de seus átomos



Álcool etílico



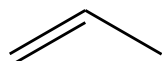
Éter dimetílico

São isômeros constitucionais

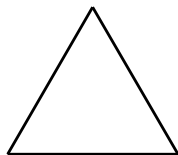
## Isômeros constitucionais

- Têm a mesma fórmula molecular, mas diferentes conectividades dos átomos (diferentes fórmulas estruturais).
- Tipos:

Isomeria de CADEIA



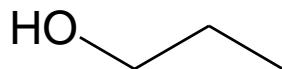
Propeno



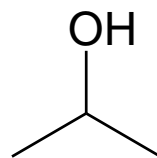
Ciclopropano

F.M.:  $C_3H_6$

Isomeria de POSIÇÃO



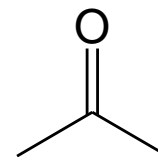
1-propanol



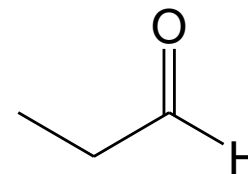
2-propanol

F.M.:  $C_3H_8O$

Isomeria de FUNÇÃO



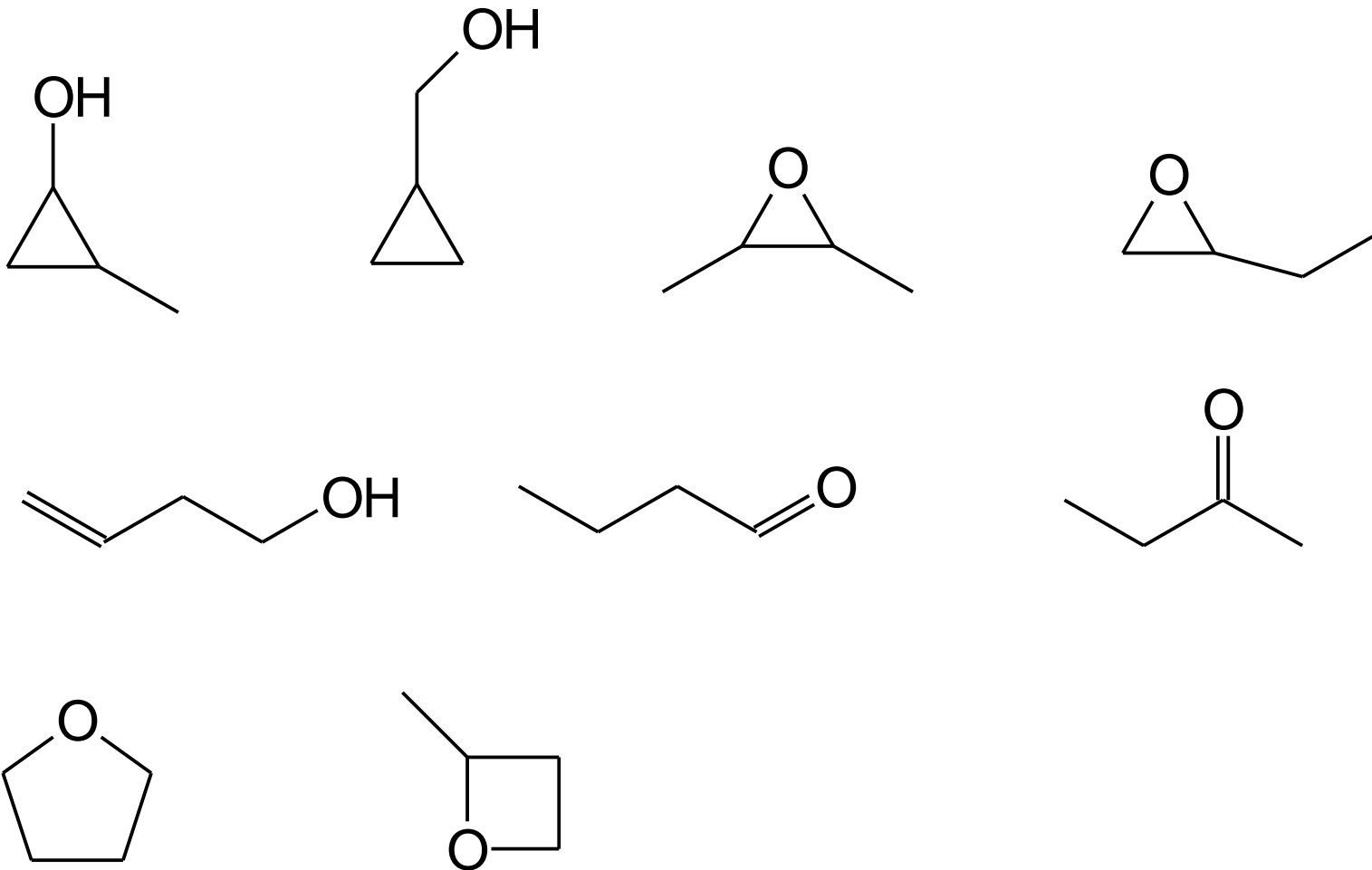
Propanona



Propanal

F.M.:  $C_3H_6O$

Para a fórmula molecular  $C_4H_8O$ , são possíveis as seguintes fórmulas estruturais:



# 3 – Forças intermoleculares

➤ Propriedades físicas (Temperatura de Fusão e de Ebulição) e Solubilidade ➡ dependem das forças intermoleculares! (As forças intermoleculares são mais fracas que uma ligação covalente.)

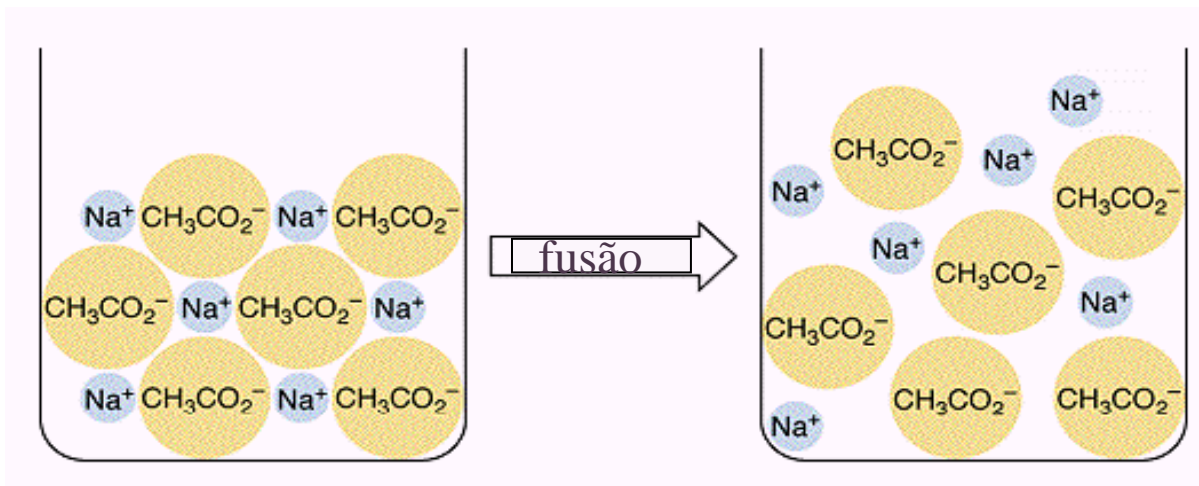
➤ Tipos:

- Íon-íon
- Íon-dipolo
- Dipolo-dipolo
- Ligação de hidrogênio
- Van der Waals



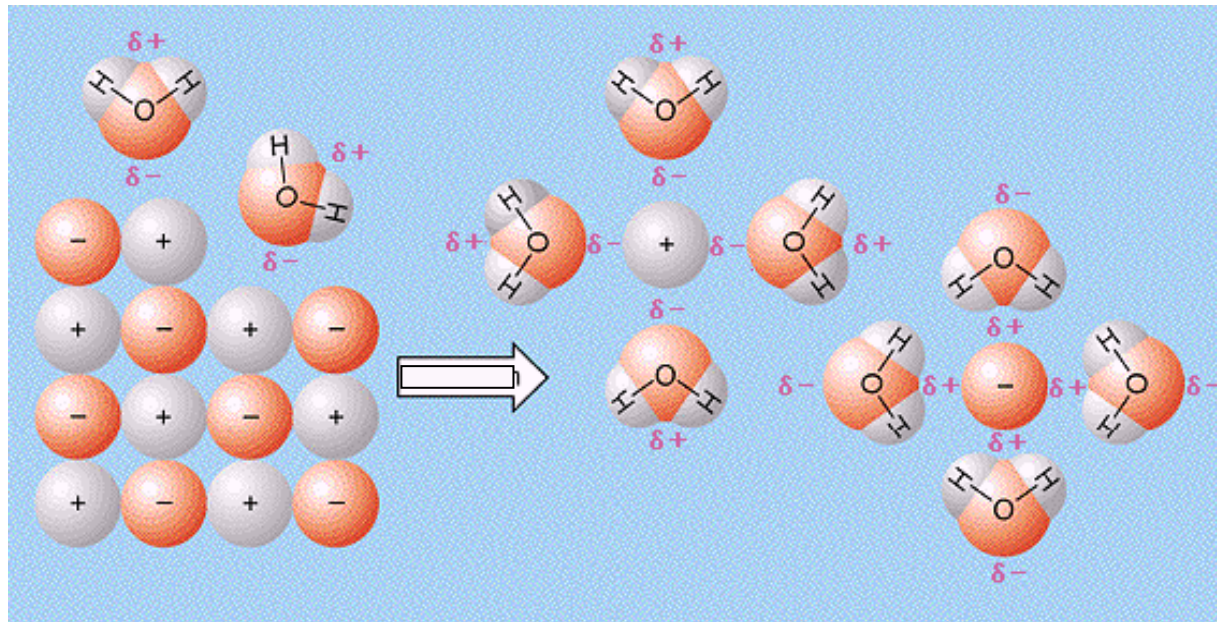
## 3.1 - Força íon-íon

- Mantém os íons unidos no estado cristalino.
- São **forças eletrostáticas de rede fortes**.
- É necessário grande energia térmica para separar os íons.



## 3.2 - Força íon-dipolo

- Atração entre íons e moléculas polares.
- Presentes em solução contendo íon e solvente polar.  
Ex.: Solução aquosa de NaCl.



### 3.3 - Força dipolo-dipolo

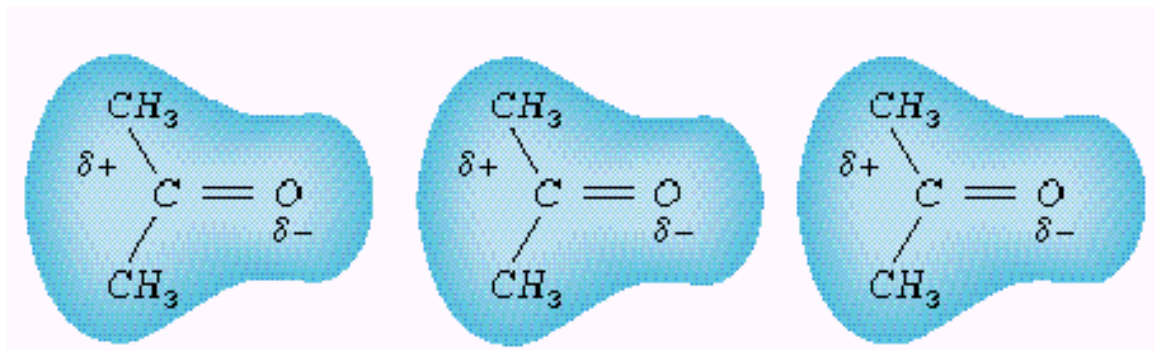
Moléculas POLARES ( $\mu \neq 0$ )



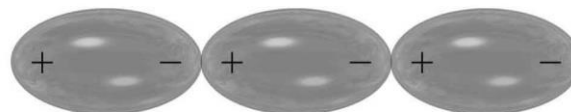
Distribuição não-uniforme dos elétrons na molécula.



Orientação das extremidades atrativas

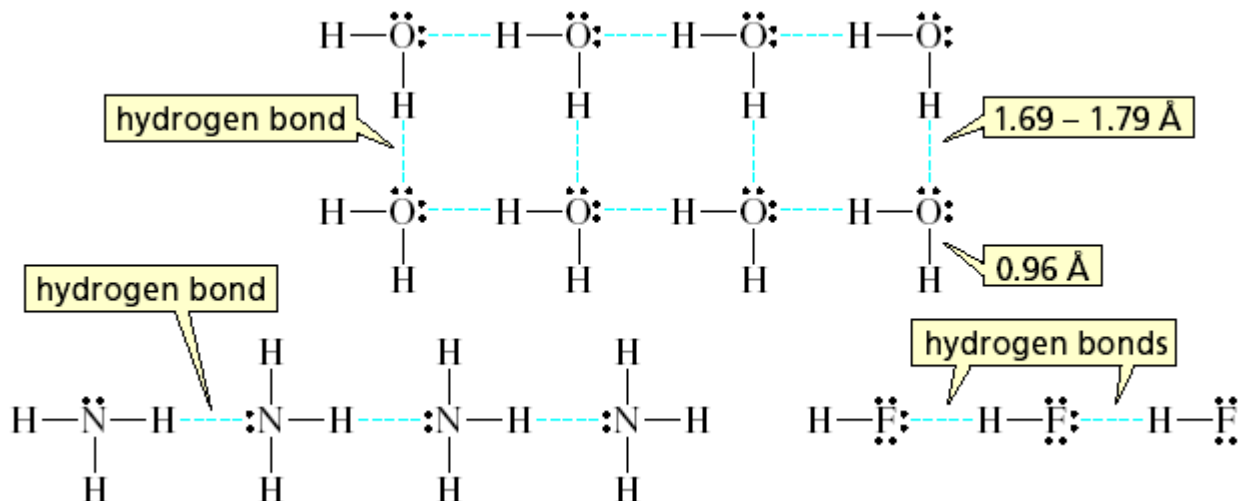
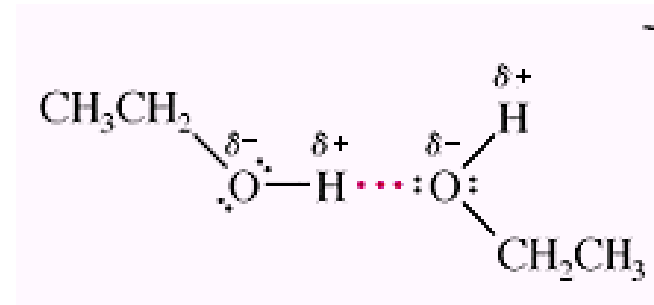


symbolized by

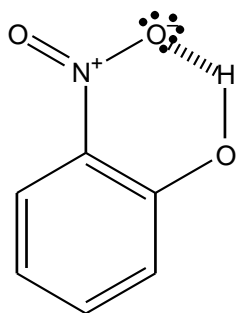


## 3.4 - Ligação de hidrogênio

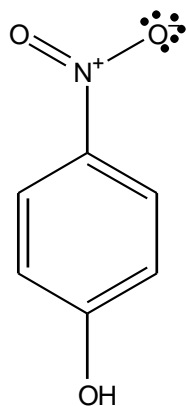
- Tipo especial de dipolo-dipolo.
- Ocorre entre:
  - Átomos de hidrogênio ligados a átomos pequenos e fortemente eletronegativos (F, N e O) e pares de elétrons não ligantes.



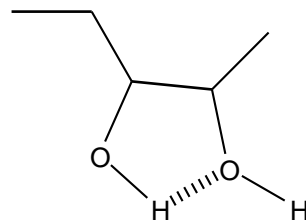
- Dois tipos de ligação de hidrogênio:
  - Intramolecular (ocorre na mesma molécula);
  - Intermolecular (ocorre entre duas moléculas).
- Intramolecular com formação de anéis de 5 ou 6 membros.



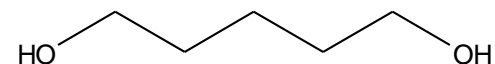
peb: 214°C  
pf: 45°C



peb: 279°C  
pf: 113°C



2,3-pentanodiol  
peb: 188°C



1,5-pentanodiol  
peb: 238°C

## 3.5 - Forças de Van der Waals

Moléculas APOLARES ( $\mu = 0$ )



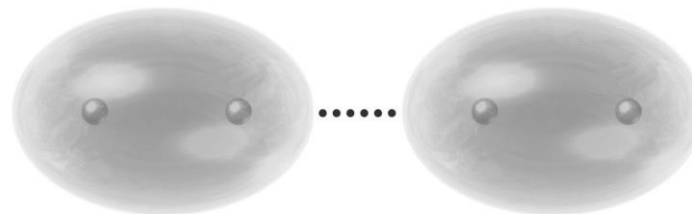
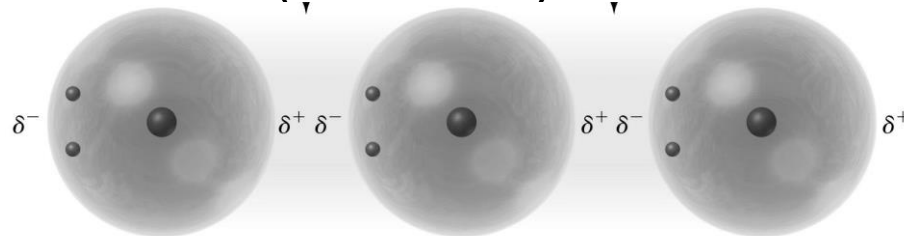
Movimento de elétrons



Dipolo TEMPORÁRIO



Dipolos INDUZIDOS (atrativos) nas moléculas vizinhas

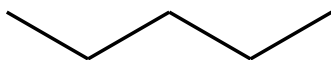


H<sub>2</sub>

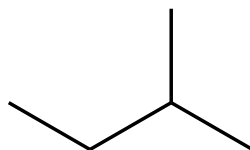
H<sub>2</sub>

## Influência da superfície nas forças de Van der Waals

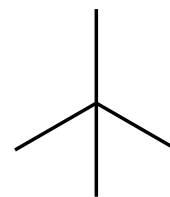
- A força de Van der Waals atua somente a distâncias muito pequenas. Ela será maior quanto maior for a área de contato entre as moléculas.
- Para alcanos de mesmo n<sup>o</sup> de átomos de carbono, a temperatura de ebulição diminui com o aumento da ramificação da cadeia. Ex.:



36°C



28 °C



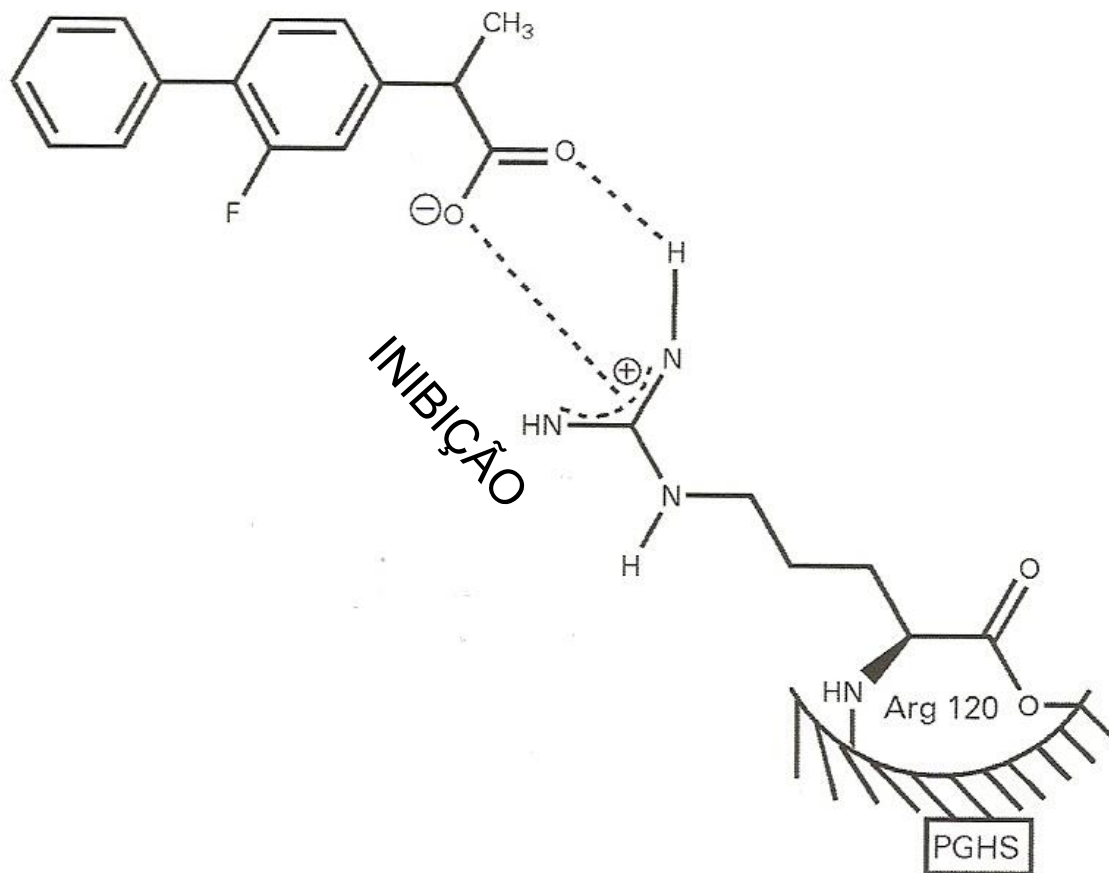
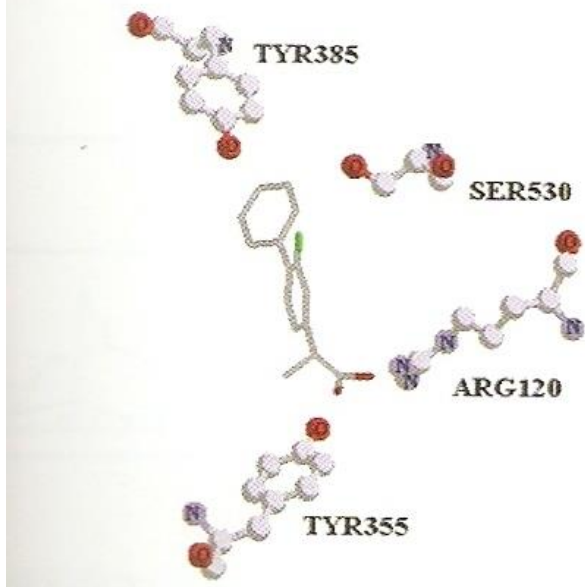
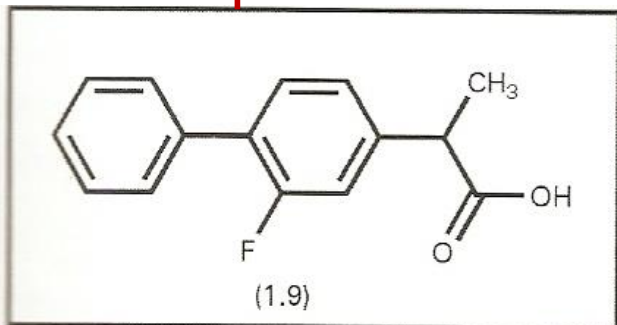
9,5 °C

Importante: Quanto mais forte as forças intermoleculares (de atração), maior é a temperatura na qual um líquido entra em ebulição e maior é o ponto de fusão de um sólido.



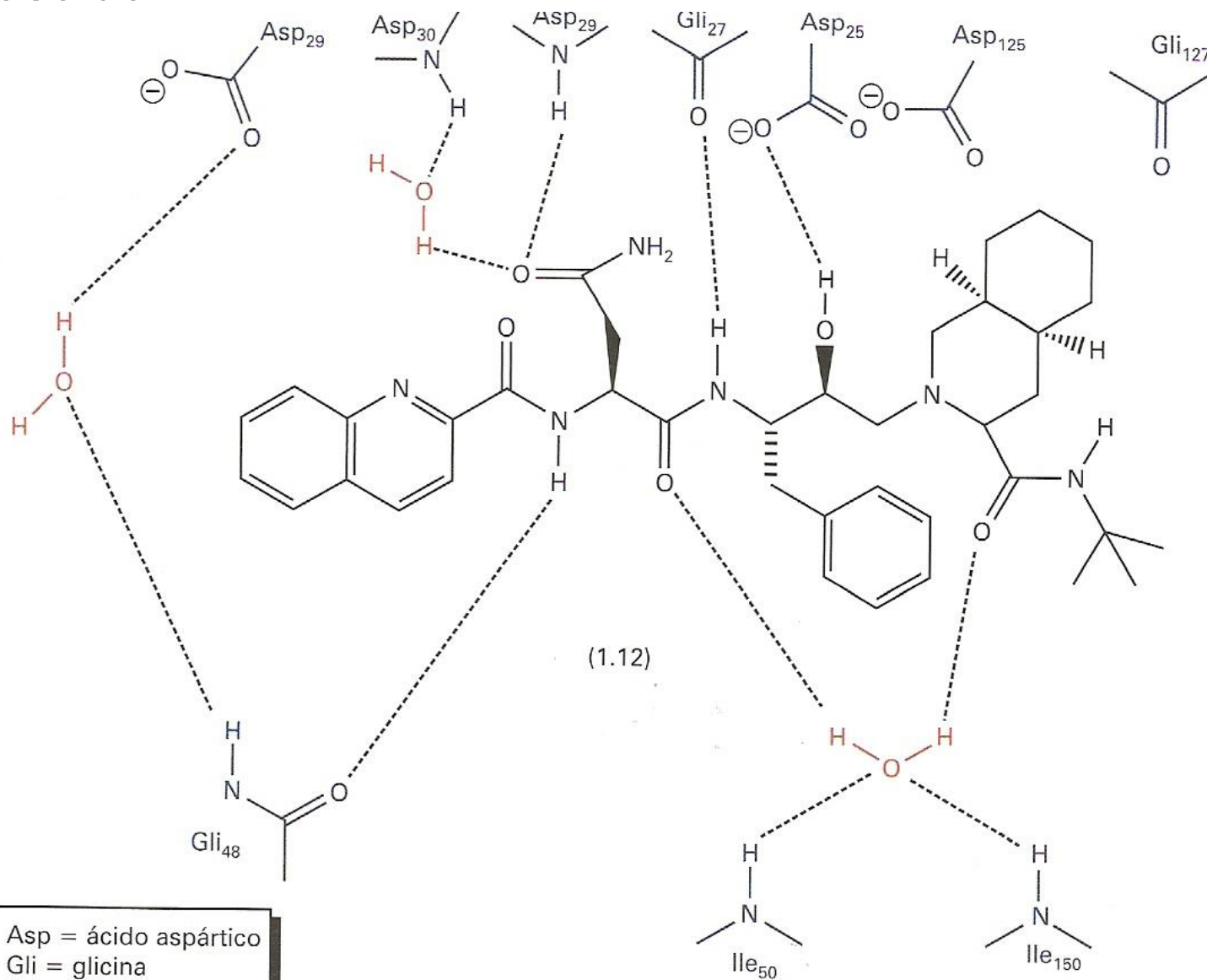
# Exemplos da importância das forças de interações intermoleculares

## flurbiprofeno



PGHS – prostaglandina endoperóxido sintase

Antiviral **saquinavir** interagindo com aminoácidos do sítio ativo da protease do HIV.

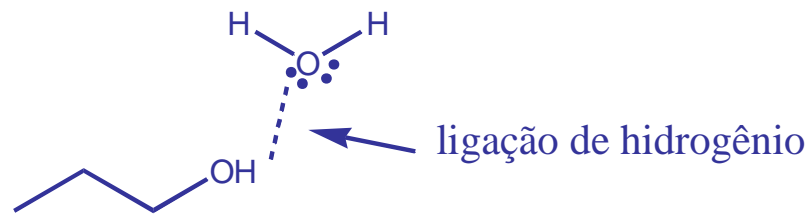


Asp = ácido aspártico  
Gli = glicina  
Ile = isoleucina

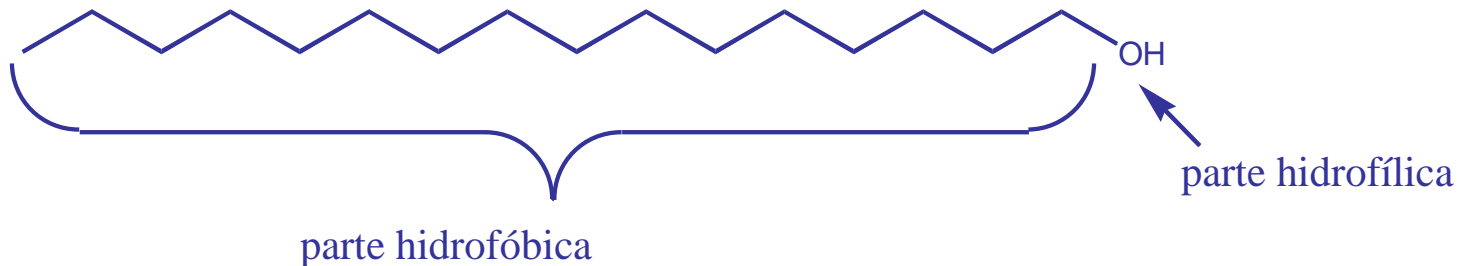
## 3.6 - Solubilidade

- Depende da interação entre as moléculas do solvente e do soluto.

Solúvel em H<sub>2</sub>O



Insolúvel em H<sub>2</sub>O



## EXERCÍCIO

O álcool butílico tem ponto de ebulição (118 °C) muito mais alto que seu isômero constitucional chamado éter dietílico (35 °C). Entretanto, ambos possuem a mesma solubilidade em água (63-69 g/L). Explique detalhadamente essas duas observações.

## 4 – Bibliografia

- SOLOMONS, G.; FRYHLE, C. **Química Orgânica**, vol. 1, 7 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2001.
- BRUICE, P. **Química Orgânica**, vol.1, 4 ed. São Paulo, Pearson, 2006.