

# Química Orgânica Aplicada a Biologia

## Aula 9

---

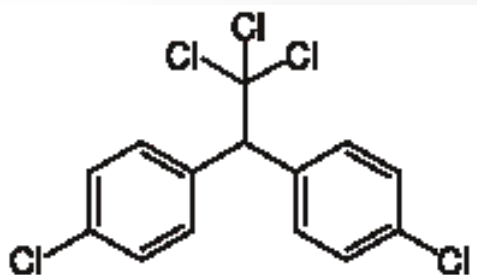
### Estudo dos Haletos de alquila

# 1. Introdução

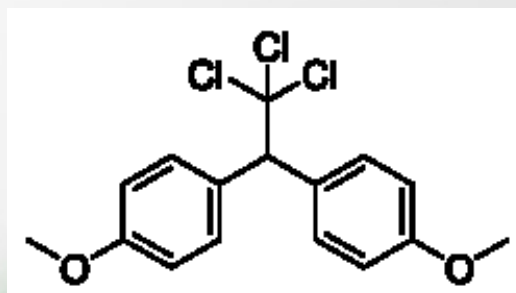
- Os haletos de alquila são compostos que possuem um halogênio ligado a um grupo alquila;
- Além da importância em síntese orgânica, os haletos de alquila também têm grande importância industrial e no cotidiano;
- O **tetracloroeto de carbono** ( $\text{CCl}_4$ ), **triclorometano** ( $\text{CHCl}_3$ ) e **1,1,2-tricloroetano** ( $\text{Cl}_2\text{C}=\text{CHCl}$ ) são empregados como solventes industriais;
- O **diclorodifluormetano** (Freon,  $\text{CCl}_2\text{F}_2$ ) é utilizado em refrigerantes e também teve uso como propelente em aerossóis;
- Também são utilizados em polímeros, tais como o **teflon**, entre outros.

# 1. Introdução – Pesticidas Organoclorados

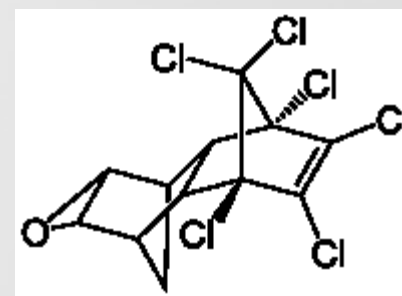
- Diversos pesticidas utilizados na agricultura também são derivados de haletos de alquila;



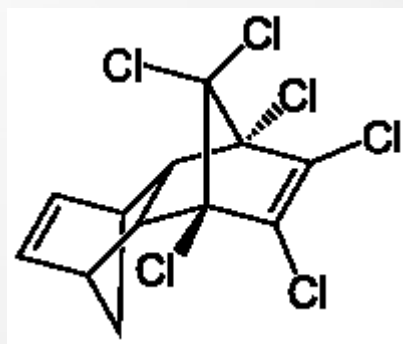
**DDT**



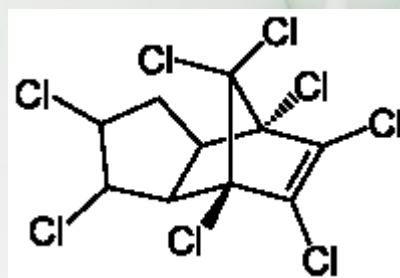
**Metoxiclor**



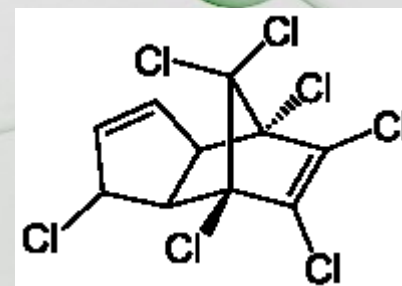
**Dieldrin/Endrin**



**Aldrin**



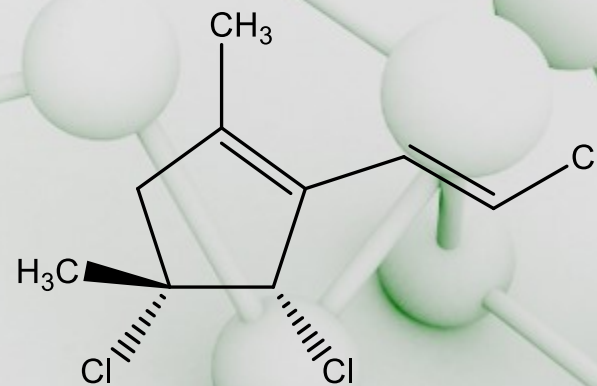
**Clordane**



**Heptaclor**

# 1. Introdução

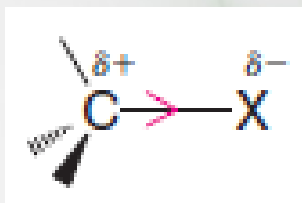
- O número de haletos de alquila naturais conhecidos ainda é pequeno (cerca de 2.600 compostos) e a maioria deles foi isolado de microorganismos marinhos;
- Alguns desses compostos são muito tóxicos;
- Também foram identificados haletos de alquila naturais com atividade biológica;
- Exemplo: **Plocameno B**, isolado da alga vermelha (*Plocamiun violaceum*), possui atividade inseticida contra larvas de mosquito, semelhante ao **DDT**:



**Plocameno B**

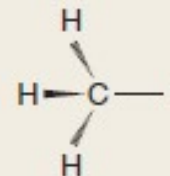
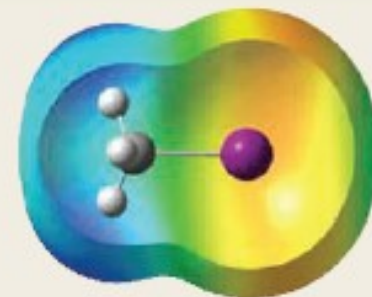
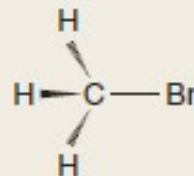
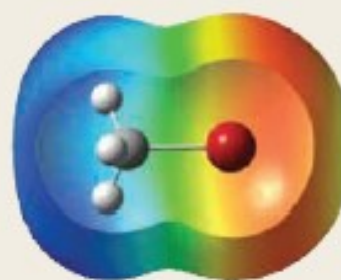
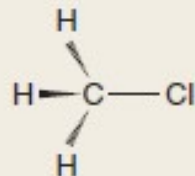
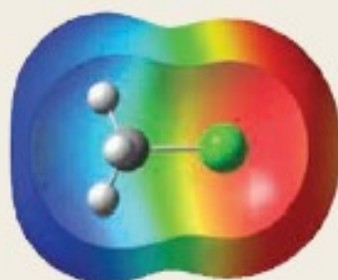
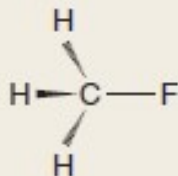
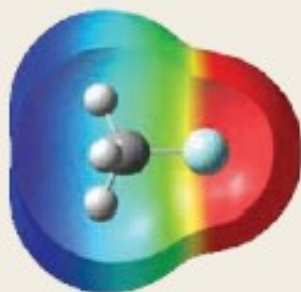
## 2. Propriedades Físicas e estruturais

- A ligação carbono-halogênio é formada pela sobreposição de um orbital híbrido do carbono com um orbital  $sp^3$  do halogênio;
- O comprimento da ligação aumenta a medida que aumenta o tamanho do átomo de halogênio, assim a ligação **C-F** tem um comprimento de **1,39Å**;
- Ao passo que a ligação **C-I** tem um comprimento de 2,14Å;
- Como os halogênios são mais eletronegativos que o carbono, a ligação **C-X** é polarizada (Eletronegatividades: **C**(2,5), **F**(4,0), **Cl**(3,5), **Br**(2,8) e **I**(2,5));



## 2. Propriedades Físicas e estruturais

TABLE 6.1 Carbon–Halogen Bond Lengths and Bond Strengths



C—X Bond length (Å) 1.39  
C—X Bond strength 472  
(kJ mol<sup>-1</sup>)

1.78  
350

1.93  
293

2.14  
239

## 2. Propriedades Físicas e estruturais

- Mesmo sendo moléculas polarizadas, os haletos de alquila apresentam **baixa solubilidade em água**;
- Em virtude da **maior massa molar**, devido ao halogênio, os haletos de alquila apresentam **ponto de ebulição mais elevados**, comparados aos **alcanos** de mesmo **número de carbonos**;
- No caso dos **haletos de alquila com o mesmo número de carbonos**, a **temperatura de ebulição aumenta com o aumento da massa molar do halogênio**;

## 2. Propriedades Físicas e estruturais

- As propriedades físicas de alguns haletos orgânicos mais comuns são listadas na tabela abaixo:

TABLE 6.2 Organic Halides

Group	Fluoride		Chloride		Bromide		Iodide	
	bp (°C)	Density <sup>a</sup> (g mL <sup>-1</sup> )	bp (°C)	Density <sup>a</sup> (g mL <sup>-1</sup> )	bp (°C)	Density <sup>a</sup> (g mL <sup>-1</sup> )	bp (°C)	Density <sup>a</sup> (g mL <sup>-1</sup> )
Methyl	-78.4	0.84 <sup>-60</sup>	-23.8	0.92 <sup>20</sup>	3.6	1.73 <sup>0</sup>	42.5	2.28 <sup>20</sup>
Ethyl	-37.7	0.72 <sup>20</sup>	13.1	0.91 <sup>15</sup>	38.4	1.46 <sup>20</sup>	72	1.95 <sup>20</sup>
Propyl	-2.5	0.78 <sup>-3</sup>	46.6	0.89 <sup>20</sup>	70.8	1.35 <sup>20</sup>	102	1.74 <sup>20</sup>
Isopropyl	-9.4	0.72 <sup>20</sup>	34	0.86 <sup>20</sup>	59.4	1.31 <sup>20</sup>	89.4	1.70 <sup>20</sup>
Butyl	32	0.78 <sup>20</sup>	78.4	0.89 <sup>20</sup>	101	1.27 <sup>20</sup>	130	1.61 <sup>20</sup>
sec-Butyl	—	—	68	0.87 <sup>20</sup>	91.2	1.26 <sup>20</sup>	120	1.60 <sup>20</sup>
Isobutyl	—	—	69	0.87 <sup>20</sup>	91	1.26 <sup>20</sup>	119	1.60 <sup>20</sup>
tert-Butyl	12	0.75 <sup>12</sup>	51	0.84 <sup>20</sup>	73.3	1.22 <sup>20</sup>	100 dec <sup>b</sup>	1.57 <sup>0</sup>

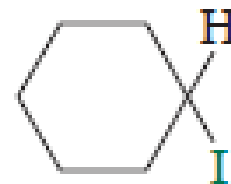
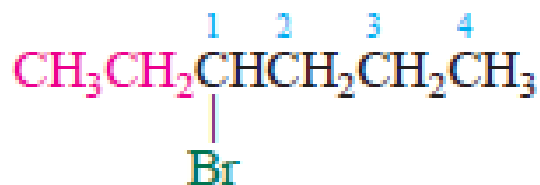
<sup>a</sup>Densities were measured at temperature (°C) indicated in superscript.

<sup>b</sup>Decomposes is abbreviated dec.



### 3. Nomenclatura

- Na nomenclatura de classe funcional os grupos alquila e os haletos (fluoreto, cloreto, brometo e iodeto) são designados como palavras separadas pela preposição **de**;
- O grupo alquila se baseia cadeia carbônica contínua mais longa no carbono, que começa no carbono ao qual o halogênio está ligado;



Fluoreto de metila

Cloreto de pentila

Brometo de 1-Etilbutila

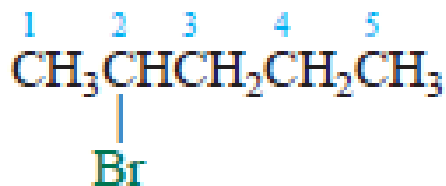
Iodeto de Cicloexila

### 3. Nomenclatura

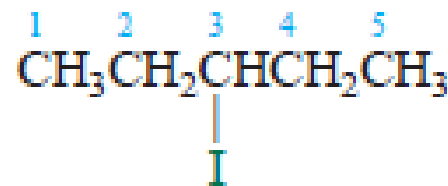
- A **nomenclatura substitutiva** dos haletos de alquila trata o halogênio como um substituinte *halo* (*fluoro-*, *cloro-*, *bromo-* ou *iodo-*) em uma cadeia de alcano;
- A cadeia carbônica é numerada na direção que fornece ao carbono substituído o menor número:



1-Fluoropentano



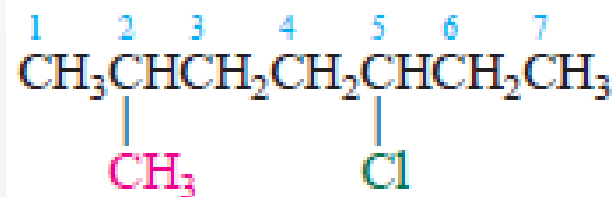
2-Bromopentano



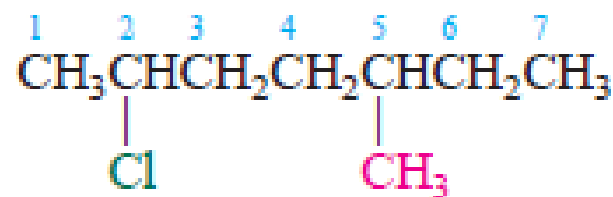
3-Iodopentano

### 3. Nomenclatura

- Quando a cadeia carbônica leva **um halogênio** e **um substituinte alquila**, os dois são considerados como tendo **igual importância** e a cadeia é numerada de modo a designar o menor número ao substituinte mais próximo do final da cadeia:



5-Cloro-2-metileptano



2-Cloro-5-metileptano