

INFORME-SE SOBRE A QUÍMICA

Eduardo Leite do Canto

Autor de *Química na Abordagem do Cotidiano* – Editora Saraiva

Como avaliar a tensão em ciclanos?

Método simples envolve apenas as entalpias-padrão de combustão.

É conceito bem estabelecido da Química Orgânica que, dentre os ciclanos, é o ciclo-hexano que apresenta a estrutura tridimensional que torna mínimas as **tensões angulares** e as **tensões torcionais**. A minimização das tensões angulares ocorre porque os ângulos de ligação são $109^{\circ}28'$ e a minimização das tensões torcionais se deve à maior distância possível entre os hidrogênios de carbonos vizinhos.

Como quantificar o efeito dessas tensões nos demais ciclanos, comparando-os ao ciclo-hexano?

Isso pode ser feito a partir dos valores experimentais de **entalpia-padrão de combustão** (ou, corriqueiramente, **calor de combustão**). A segunda coluna da tabela mostra $\Delta H_c^{\circ}(\text{exp.})$ para os ciclanos de três a dez carbonos.

A fórmula geral dos ciclanos é C_nH_{2n} , ou seja, eles apresentam a fórmula mínima CH_2 . Consideremos $\Delta H_c^{\circ}(\text{exp.})$ do ciclo-hexano: $3.920 \text{ kJ mol}^{-1}$. Como esse composto tem fórmula $(CH_2)_6$, podemos dividir o valor por 6, encontrando o calor de combustão **por CH_2** : $653,33 \text{ kJ mol}^{-1}$.

Vejam, agora, o caso do ciclo-propano, $(CH_2)_3$. Se multiplicarmos $653,33 \text{ kJ mol}^{-1}$ por 3, chegaremos a $1.960 \text{ kJ mol}^{-1}$ como valor teoricamente calculado para o ΔH_c° . No entanto, o valor experimental é $2.091 \text{ kJ mol}^{-1}$. A diferença entre $\Delta H_c^{\circ}(\text{exp.})$ e $\Delta H_c^{\circ}(\text{calc.})$, que é de 131 kJ mol^{-1} , indica que o

ciclo-propano tem conteúdo energético **maior** do que seria de se esperar tomando o ciclo-hexano por base. Em outras palavras, quando o ciclo-propano sofre combustão, ocorre a **liberação adicional de energia** de 131 kJ mol^{-1} **proveniente das tensões** existentes nesse composto.

Os valores de $\Delta H_c^{\circ}(\text{calc.})$ estão na terceira coluna da tabela. A quarta coluna mostra a diferença [$\Delta H_c^{\circ}(\text{exp.}) - \Delta H_c^{\circ}(\text{calc.})$]. Os valores confirmam que o **ciclo-hexano é o mais estável deles**, pois a diferença não é negativa em nenhum dos casos. Os ciclos de três e quatro carbonos apresentam, respectivamente, a maior e a segunda maior diferenças, resultado da considerável tensão angular nesses compostos. Também pode-se perceber que (ao contrário do que alguns pensam) ciclos de 7 a 10 carbonos não são tão estáveis quanto o ciclo-hexano.

E se desejássemos fazer essa comparação entre ciclanos usando entalpias-padrão de formação, como deveríamos proceder?

E isso tem a ver com...

- Termoquímica — v. 2, unidade F, e vu, cap. 21
- Substituição em ciclanos — v. 3, cap. 16, e vu, cap. 30

Química na Abordagem do Cotidiano, 3 volumes.
Química na Abordagem do Cotidiano, volume único.



Entalpia-padrão de combustão, experimental e calculada, de ciclanos de 3 a 10 carbonos.

Carbonos	$\Delta H_c^{\circ}(\text{exp.})$ (kJ mol^{-1})	$\Delta H_c^{\circ}(\text{calc.})$ (kJ mol^{-1})	Diferença (kJ mol^{-1})
3	2.091	1.960	131
4	2.721	2.613	108
5	3.291	3.267	24
6	3.920	3.920	0
7	4.599	4.573	26
8	5.267	5.227	40
9	5.933	5.880	53
10	6.587	6.533	54

Maiores tensões

Menores tensões