

Química Orgânica

É o ramo da química que estuda os compostos que contêm carbono na sua estrutura – **COMPOSTOS ORGÂNICOS**.

Em 1777, a química foi dividida pela primeira vez pelo químico BERGMAN em:

Química orgânica - a química dos seres vivos

Química Inorgânica – a química dos seres não vivos

Substâncias

```
graph TD; A[Substâncias] --> B[ORGÂNICAS]; A --> C[INORGÂNICAS]; B --> D["Metano - CH4<br/>Metanol - CH3 CH2 OH<br/>Acetona - CH3COCH3"]; C --> E["Água - H2O<br/>Ácido Sulfúrico - H2SO4<br/>Cloreto de Sódio - Na Cl"];
```

ORGÂNICAS

Metano - CH_4
Metanol - $\text{CH}_3 \text{CH}_2 \text{OH}$
Acetona - CH_3COCH_3

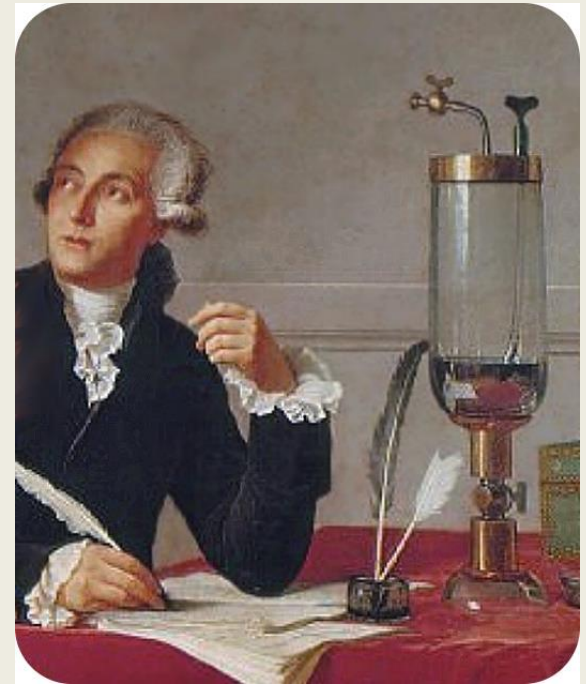
INORGÂNICAS

Água - H_2O
Ácido Sulfúrico - H_2SO_4
Cloreto de Sódio - Na Cl

OBS.: Existem algumas substâncias que, embora contenham carbono na sua estrutura, NÃO são consideradas substâncias orgânicas, e sim INORGÂNICAS. Por exemplo:

- Grafite
- Diamante
- Monóxido de carbono – CO
- Dióxido de carbono – CO₂
- Ácido carbônico – H₂CO₃
- Ácido cianídrico - HCN

No século XVIII – cientista francês – **Lavoisier** descobriu que muitos compostos encontrados nos seres vivos tinham em comum, o fato de serem constituídos por partículas de **carbono**.



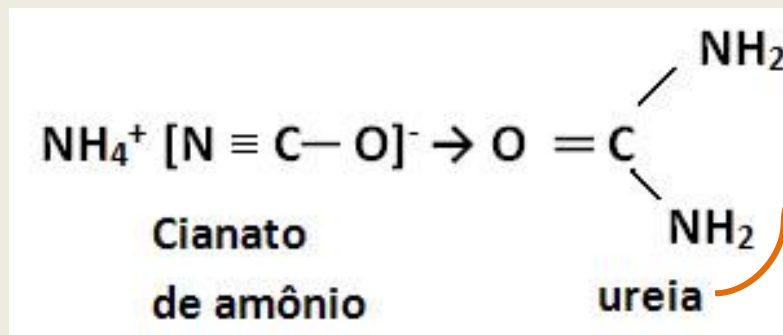


Em 1807, o químico Berzelius lançou a idéia que somente seres vivos possuiriam uma “força vital” capaz de produzir os compostos orgânicos – **Teoria do Vitalismo**

“A força vital é inerente a célula viva e ninguém poderia cria-la em laboratório.”



Em 1828, Wöhler (**trabalhou com Berzelius**) derrubou a teoria da “força Vital” produzindo um composto orgânico a partir de um composto inorgânico.



Sintetizada de forma acidental

20 anos depois, **Kolbe**, produziu **ácido acético** à partir de seus elementos e assim a Teoria da Força Vital foi derrubada!

E a química orgânica começou sua evolução.....

Análise e Síntese Orgânica

DIVULGAÇÃO

ESTRATÉGIAS PARA A OBTENÇÃO DE COMPOSTOS FARMACOLOGICAMENTE ATIVOS A PARTIR DE PLANTAS MEDICINAIS. CONCEITOS SOBRE MODIFICAÇÃO ESTRUTURAL PARA OTIMIZAÇÃO DA ATIVIDADE *

Valdir Cechinel Filho

FAQFAR - Universidade do Vale do Itajaí (UNIVALI) - CP 360 - 88302-202 - Itajaí - SC

Rosendo A. Yunes

Departamento de Química - Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC) - 88040-900 - Florianópolis - SC

Recebido em 28/11/96; aceito em 20/2/97

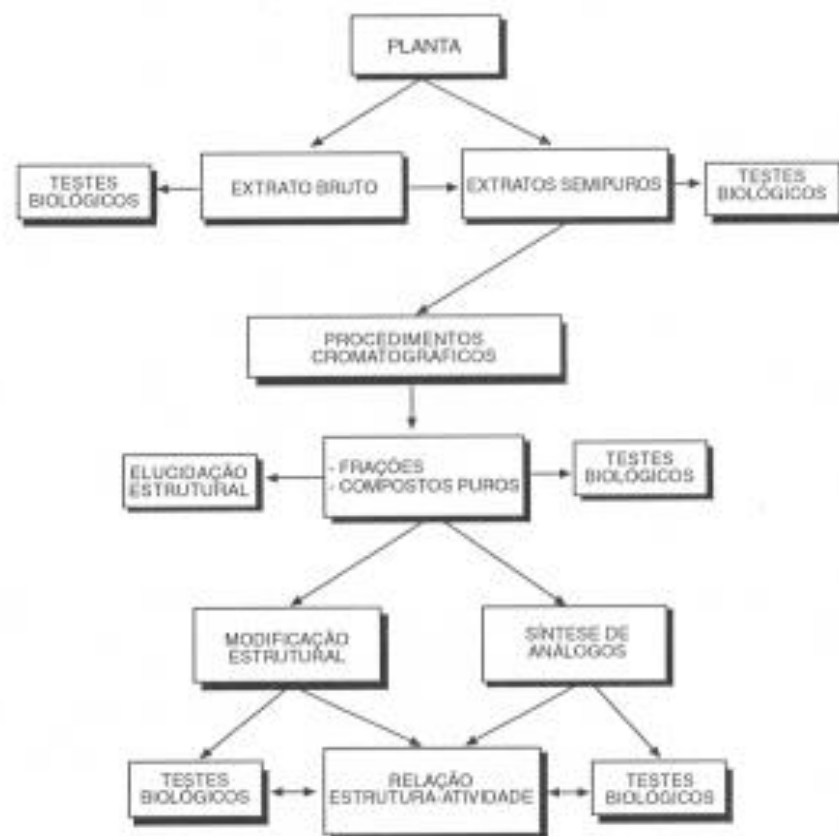


Figura 1. Procedimentos gerais para a obtenção de compostos biologicamente ativos.

As pesquisas com plantas medicinais, envolvem:

- investigações da medicina tradicional e popular (etnobotânica);
- isolamento, purificação e caracterização de princípios ativos (química orgânica: fitoquímica);
- investigação farmacológica de extratos e dos constituintes químicos isolados (farmacologia);
- transformações químicas de princípios ativos (química orgânica sintética); estudo da relação estrutura/atividade e dos mecanismos de ação dos princípios ativos (química medicinal e farmacologia) e finalmente a operação de formulações para a produção de fitoterápicos.

A integração destas áreas na pesquisa de plantas medicinais conduz a um caminho promissor e eficaz para descobertas de novos medicamentos!

Quim. Nova, Vol. 25, No. 3, 429-438, 2002.

PLANTAS MEDICINAIS: A NECESSIDADE DE ESTUDOS MULTIDISCIPLINARES

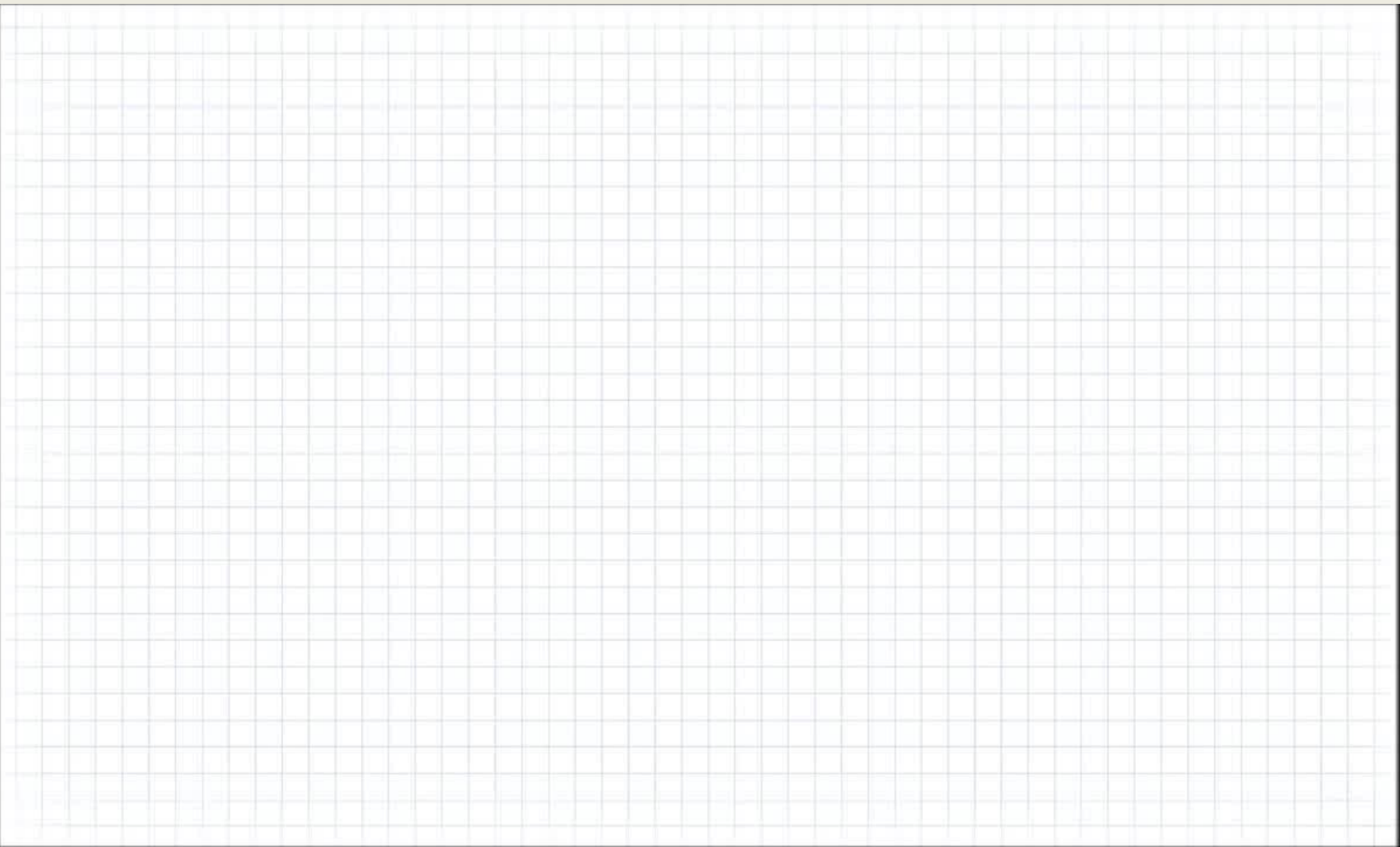
Maria Aparecida M. Maciel*, Angelo C. Pinto e Valdir F. Veiga Jr.

Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, CT, Cidade Universitária, 21945- 970 Rio de Janeiro - RJ

Noema F. Grynberg e Aurea Echevarria

Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, 23851-970 Seropédica - RJ

Recebido em 6/11/00; aceito em 25/7/01



Características do Carbono

Família do Carbono

1 1 A																	18 0
1 H Hidrogênio	2 2 A											13 3 A	14 4 A	15 5 A	16 6 A	17 7 A	He Hélio
2 Li Lítio	Be Berílio											B Boro	C Carbono	N Nitrogênio	O Oxigênio	F Fluor	Ne Neônio
3 Na Sódio	Mg Magnésio	3 3 B	4 4 B	5 5 B	6 6 B	7 7 B	8	9 8 B	10	11 1 B	12 2 B	Al Alumínio	Si Silício	P Fósforo	S Enxofre	Cl Cloro	Ar Argônio
4 K Potássio	Ca Cálcio	Sc Escândio	Ti Titânio	V Vanádio	Cr Cromo	Mn Manganês	Fe Ferro	Co Cobalto	Ni Níquel	Cu Cobre	Zn Zinco	Ga Gálio	Ge Germânio	As Arsênio	Se Selênio	Br Bromo	Kr Criptônio
5 Rb Rubídio	Sr Estrôncio	Y Ítrio	Zr Zircônio	Nb Nióbio	Mo Molibdênio	Tc Tecnécio	Ru Rutênio	Rh Ródio	Pd Paládio	Ag Prata	Cd Cádmio	In Índio	Sn Estanho	Sb Antimônio	Te Telúrio	I Iodo	Xe Xenônio
6 Cs Césio	Ba Bário	Série dos Lantanídeos 57 a 71	Hf Háfrio	Ta Tântalo	W Tungstênio	Re Rênio	Os Ósmio	Ir Iridio	Pt Platina	Au Ouro	Hg Mercúrio	Tl Tálio	Pb Chumbo	Bi Bismuto	Po Polônio	At Astató	Rn Radônio
7 Fr Frâncio	Ra Rádio	Série dos Actinídeos 89 a 103	Rf Rutherfordio	Db Dúbnio	Sg Seabórgio	Bh Bóhrio	Hs Hássio	Mt Meitnério	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo

Hidrogênio

Metais Alcalinos

Metais Alcalinos Terrosos

Metais de Transição

Outros Metais

Não Metais

Gás Nobre

Série dos Lantanídeos

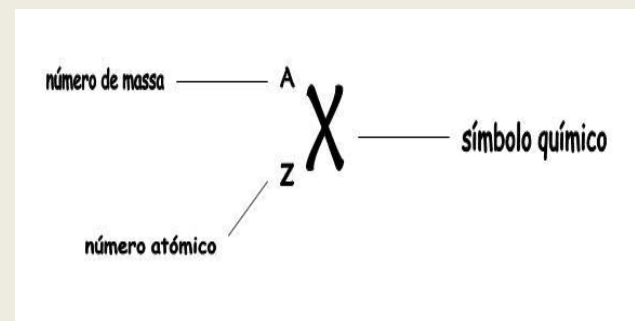
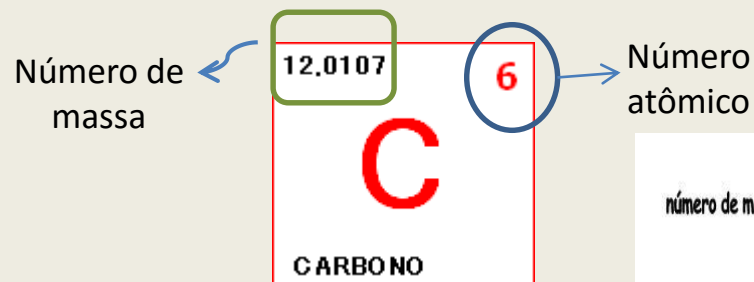
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----

Série dos Actinídeos

Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
----	----	----	---	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----	----

Carbono:

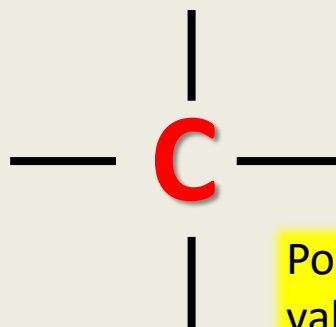
Símbolo: **C**



Distribuição eletrônica: $1s^2$ $2s^2$ $2p^2$

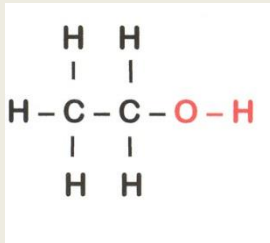


Última camada



Possui quatro
valências iguais

Os átomos de Carbono podem se ligar entre si, formando um encadeamento que chamamos de **CADEIA CARBÔNICA**.



Os Principais elementos que se ligam ao carbono:

Hidrogênio – monovalente

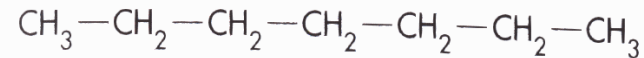
Oxigênio – divalente

Nitrogênio – trivalente

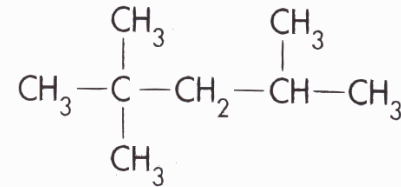
Halogênios – Monovalente

Enxofre – Divalente

Fósforo - Trivalente



n-heptano



isooctano

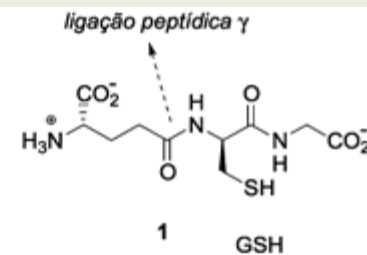
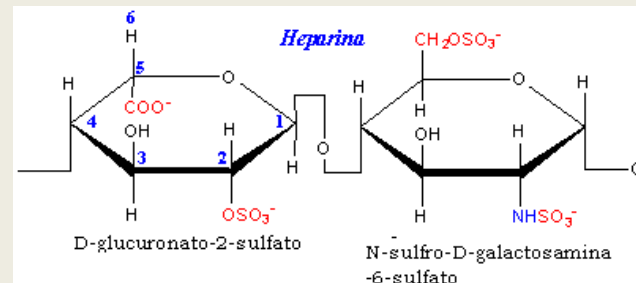


Figura 1. Glutathione (1): γ -L-glutamyl-L-cisteinilglicina



Exemplos de Compostos Orgânicos:

Medicamentos – quase todos extraídos de plantas.

Anestésicos gerais:

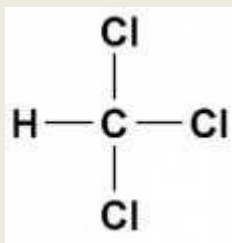
Causam inconsciência e, conseqüentemente, insensibilidade a dor.

1800 - foi descoberto o primeiro anestésico geral, o N_2O



1840 - Éter e clorofórmio.

Não é um
composto
orgânico



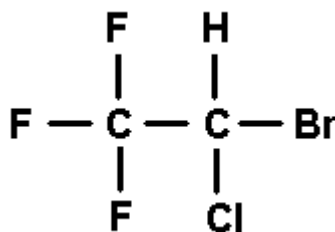
Clorofórmio



Éter dietílico



Éter divinílico

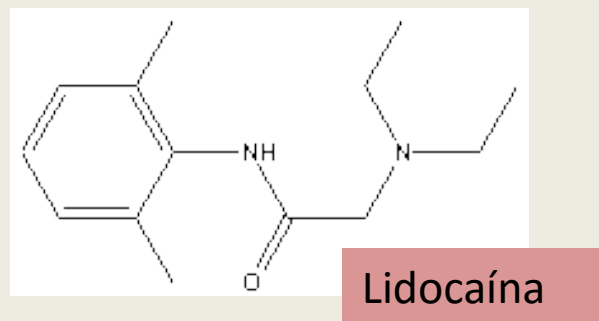
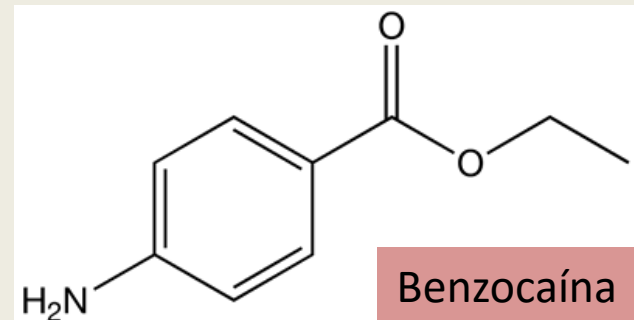
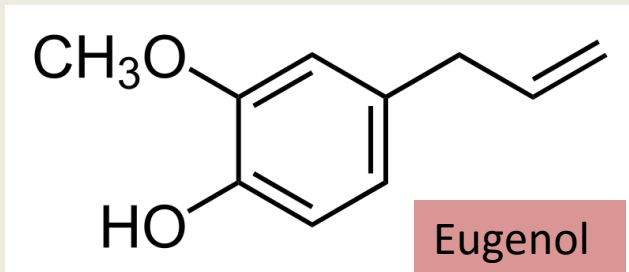


Halotano

Anestésicos locais:

Substâncias que insensibilizam o tato de uma região e, dessa forma, eliminam a sensação de dor.

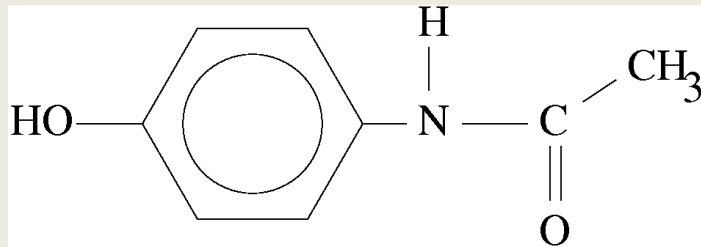
Exemplos:



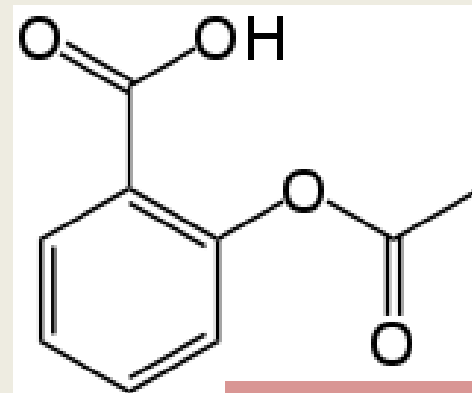
Analgésicos:

Medicamentos que combatem a dor, sem causar inconsciência ou insensibilidade.

Exemplos:



Paracetamol



Ácido
Acetilsalicílico

Cadeias carbônicas

Átomos do elemento **CARBONO** estão presentes em **TODAS** as moléculas orgânicas!!!

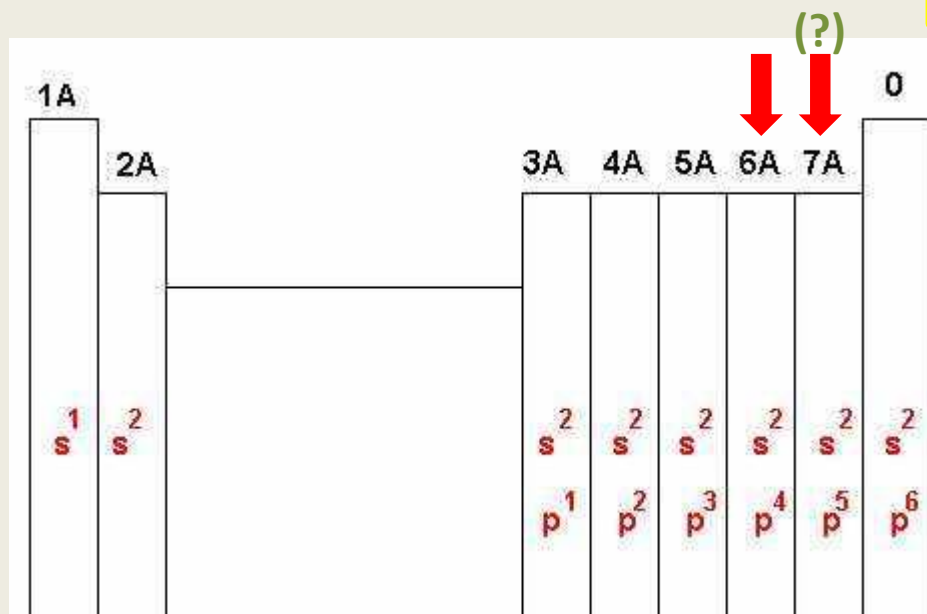
HIDROGÊNIO – na maioria das cadeias

Qualquer átomo em uma molécula orgânica que não seja carbono ou hidrogênio é chamado **HETEROÁTOMO**



...HETEROÁTOMO

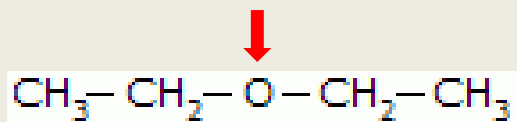
Presente entre dois carbonos, ou seja, fazendo pelo menos duas ligações com o carbono, pertencendo a **CADEIA CARBÔNICA - HETEROÁTOMO**



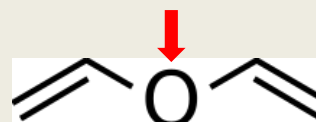
1A	2A		3A	4A	5A	6A	7A	0
1 s	2 s		2 s p ¹	2 s p ²	2 s p ³	2 s p ⁴	2 s p ⁵	2 s p ⁶

É a estrutura formada por todos os átomos de carbono de uma molécula orgânica e também pelos heteroátomos que estejam posicionados entre os carbonos!

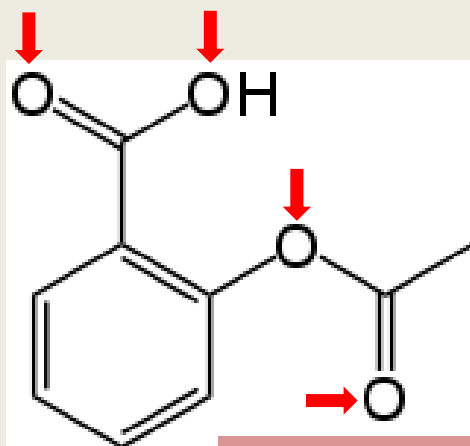
Quais cadeias contêm heteroátomos ?



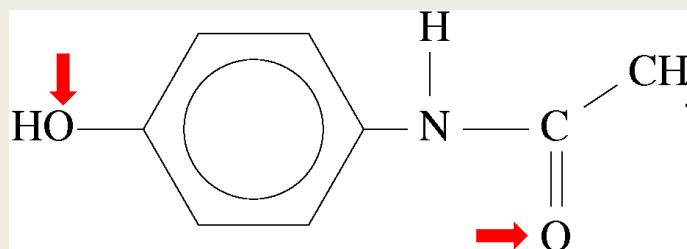
Éter dietílico



Éter divinílico



Ácido
Acetilsalicílico



Paracetamol

Fórmulas estruturais simplificadas

Cadeias carbônicas

Cadeia Aberta:

Fórmula estrutural plana aberta

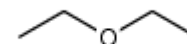
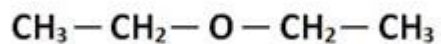
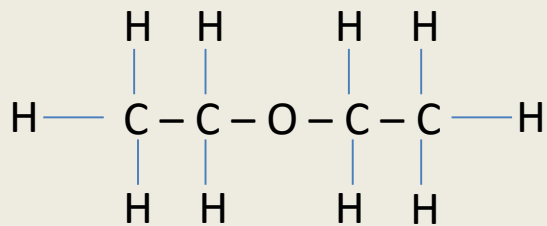
OU

Fórmula estrutural simplificada
Ou
Ligações semiexplícitas

OU

Fórmula estrutural em bastão

Ex.: Éter dietílico



Cadeia Fechada:

Fórmula estrutural aberta

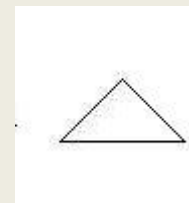
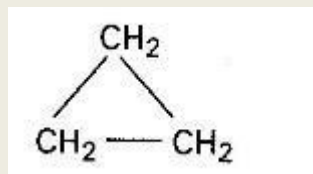
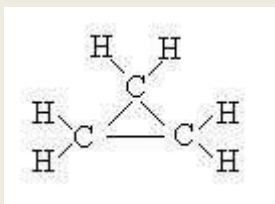
OU

Fórmula estrutural simplificada

OU

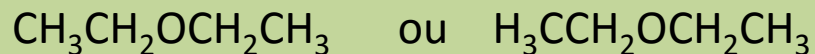
Fórmula estrutural em bastão

Ex.: Ciclo propano



Um outro modo de simplificar fórmulas orgânicas consiste em omitir os traços das ligações:

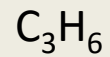
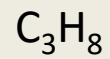
Fórmula estrutural condensada: ligações ocultas



Fórmula estrutural Tridimensional:

)))) – atrás do plano
- frente do plano

Fórmula molecular:



Geometria das moléculas orgânicas de acordo com o modelo da repulsão dos pares elétrons da camada de valência

Os pares de elétrons da camada de valência de um átomo em uma molécula, tendem a se distanciar o máximo possível uns dos outros, devido as forças de repulsão entre si.



Geometria das ligações	Ângulo de ligação
Tetraédrica	109,5°
Trigonal plana	120°
Linear	180°
Linear	180°

Classificação dos Carbonos



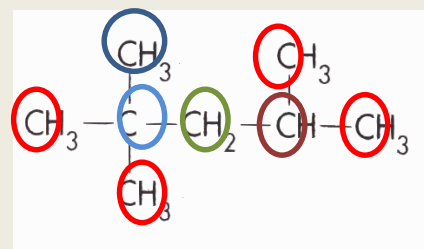
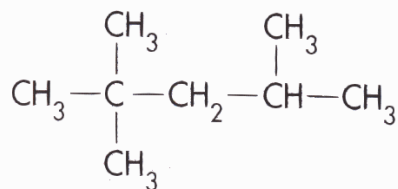
Classificar um carbono significa dizer **A QUANTOS OUTROS CARBONOS ELE SE ENCONTRA LIGADO NA CADEIA CARBÔNICA**. Isso é feito por meio de uma linguagem apropriada, que utiliza as seguintes definições:

CARBONO PRIMÁRIO: ligado a um ou a nenhum outro carbono

CARBONO SECUNDÁRIO: ligado a dois outros carbonos





CARBONO TERCIÁRIO: ligado a três outros carbonos

CARBONO QUATERNÁRIO: ligado a quatro outros carbonos



Isoctano

Um dos componentes
da gasolina

-  Carbono Primário
-  Carbono Secundário
-  Carbono Terciário
-  Carbono Quaternário

Benzeno e Compostos Aromáticos

- **Fórmula Molecular do benzeno:** C_6H_6

- **Composto altamente tóxico**



Contaminação:

Nenhuma substância química causa efeitos adversos, sem antes entrar em contato com o organismo ou ser inalado por este.

Existem quatro vias principais de exposição aos solventes orgânicos:

- 1.** Inalatória (ar inalado)
- 2.** Absorção (através da pele e olhos)
- 3.** Ingestão (deglutição)
- 4.** Transferência através da placenta de uma mãe grávida

para o seu feto

Fonte de exposição e emissão do Benzeno:

- Fumo do tabaco:

Os cigarros liberam entre 50 a 150 microgramas de benzeno cada um, e representa uma significativa fonte de exposição ao benzeno. Cerca de metade da exposição ao benzeno nos Estados Unidos provém do hábito de fumo ou à exposição à fumaça do cigarro. Enquanto há outros produtos químicos presentes nos cigarros que são cancerígenos por si próprios, o benzeno é responsável por mortes em fumantes devido à leucemia.

- Industrias

- Veículos:

Benzeno é o componente maioritário da [gasolina](#). A maioria da emissão de benzeno vem de carros e caminhões. As pessoas que vivem perto de estradas, ou que passam uma grande quantidade de tempo em seus veículos, estão mais expostas ao benzeno e têm maior risco de desenvolver câncer.

- Vapores de produtos que contenha Benzeno:

colas, tintas, cera para móveis e detergentes também podem ser uma fonte de exposição.

Cumeno

Outro produto do benzeno é o cumeno. O cumeno é usado como removedor de tintas, em lacas e esmaltes. É também usado na fabricação de vários plásticos, incluindo resinas usadas para fazer garrafas plásticas. Produtos que contêm cumeno e benzeno incluem removedor de tintas, de laca, limpador de pincéis e tinta spray.

Isopor e plásticos

Benzeno também é usado na fabricação de estireno, que é usado na confecção de isopor e outros plásticos. **Esses plásticos são frequentemente usados em recipientes para alimentos, e podem ser fonte de exposição ao benzeno, como os químicos dos recipientes podem se difundir na comida que entra em contato com eles, Ex. Bisfenol A.**

Estireno e benzeno podem ser ambos encontrados em alimentos mantidos sob refrigeração em recipientes plásticos.

Farmacocinética:

O benzeno é rapidamente absorvido através dos pulmões, aproximadamente 50% do benzeno no ar é absorvido.

Mais de 90% do benzeno ingerido é absorvido através do trato gastrointestinal. A absorção do benzeno é rápida, é distribuído por todo o corpo e tende a acumular-se no **tecido adiposo**.

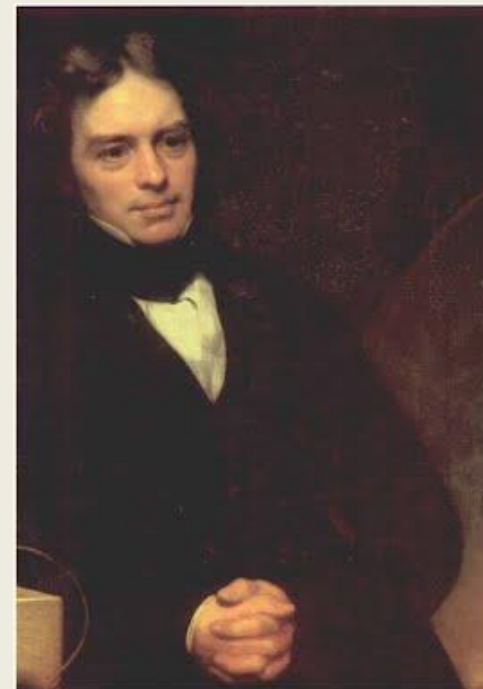
O fígado desempenha uma função importante no metabolismo do benzeno, o que resulta na produção de vários metabolitos reativos.

Na exposição a níveis mais baixos, o benzeno é rapidamente metabolizado e excretado, predominantemente como conjugados pela urina.

Na exposição a níveis mais altos, as vias metabólicas parecem tornar-se saturadas e uma grande dose de benzeno é absorvida e é excretada como composto principal no ar expirado.

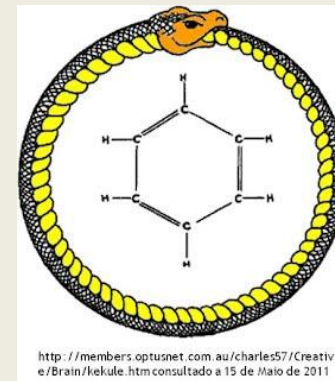
Histórico:

- 1825 – descoberto por Michael Faraday – isolou e identificou o Benzeno a partir de um liquido oleoso do gás de iluminação.



- 1834 - Mitscherlich determinou a fórmula molecular do benzeno: C_6H_6

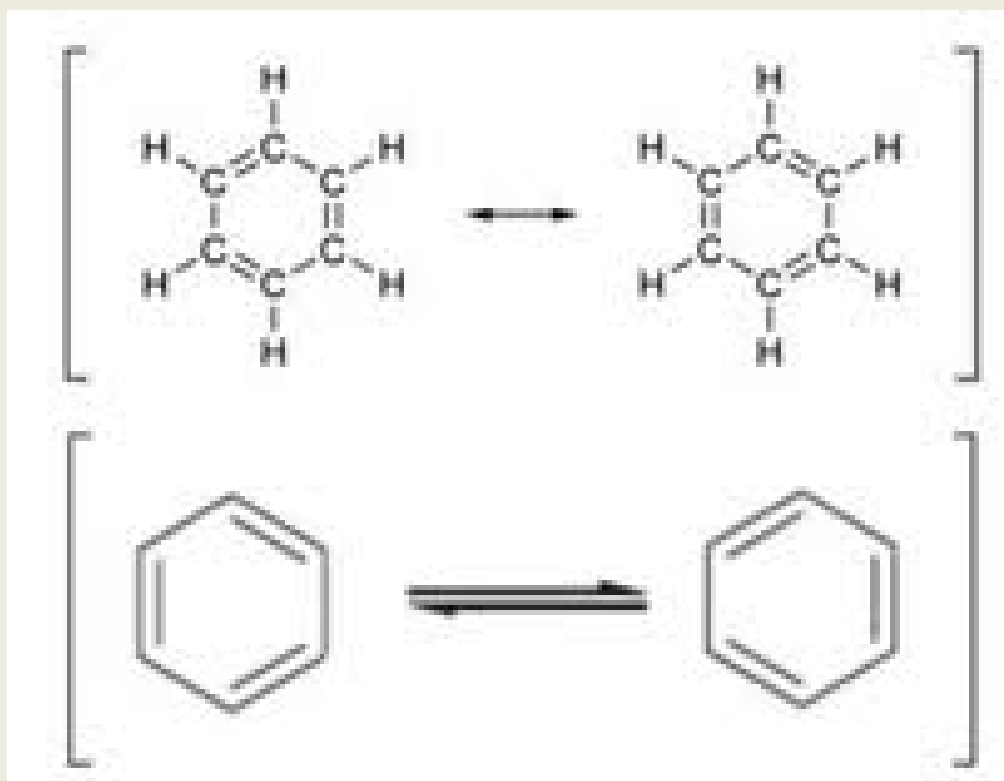
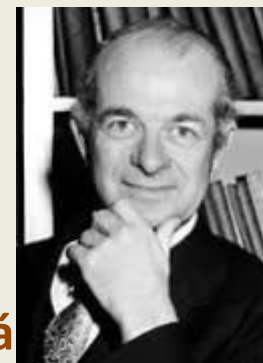
-1865 – Kekulé sugeriu sua fórmula estrutural



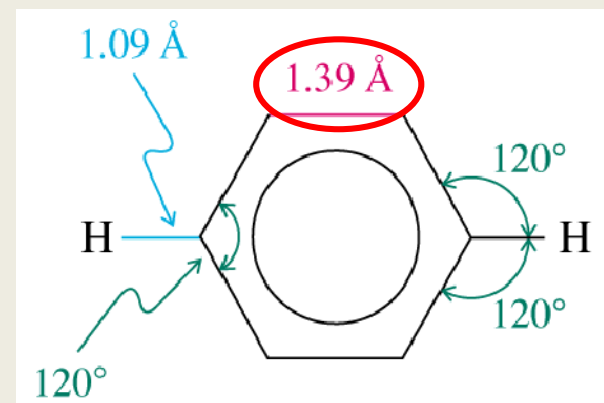
“ Eu estava sentado à mesa a escrever o meu compêndio, mas o trabalho não rendia; os meus pensamentos estavam noutro sítio. Virei a cadeira para a lareira e comecei a dormir. Outra vez começaram os átomos às cambalhotas em frente dos meus olhos. Desta vez os grupos mais pequenos mantinham-se modestamente à distância. A minha visão mental, aguçada por repetidas visões desta espécie, podia distinguir agora estruturas maiores com variadas conformações; longas filas, por vezes alinhadas e muito juntas; todas torcendo-se e voltando-se em movimentos serpenteantes. Mas olha! O que é aquilo? Uma das serpentes tinha filado a própria cauda e a forma que fazia rodopiava troscistamente diante dos meus olhos. Como se se tivesse produzido um relâmpago, acordei;... passei o resto da noite a verificar as consequências da hipótese. Aprendamos a sonhar, senhores, pois então talvez nos apercebamos da verdade.” -[Augusto Kekulé](#), 1865.¹⁵

- 1930 - Linus Pauling propôs a teoria da ressonância:

-“.....sempre que numa fórmula estrutural, pudermos mudar a posição dos elétrons, a estrutura real não será nenhuma das obtidas, mas sim um híbrido de ressonância daquelas estruturas.....” *Linus Pauling*

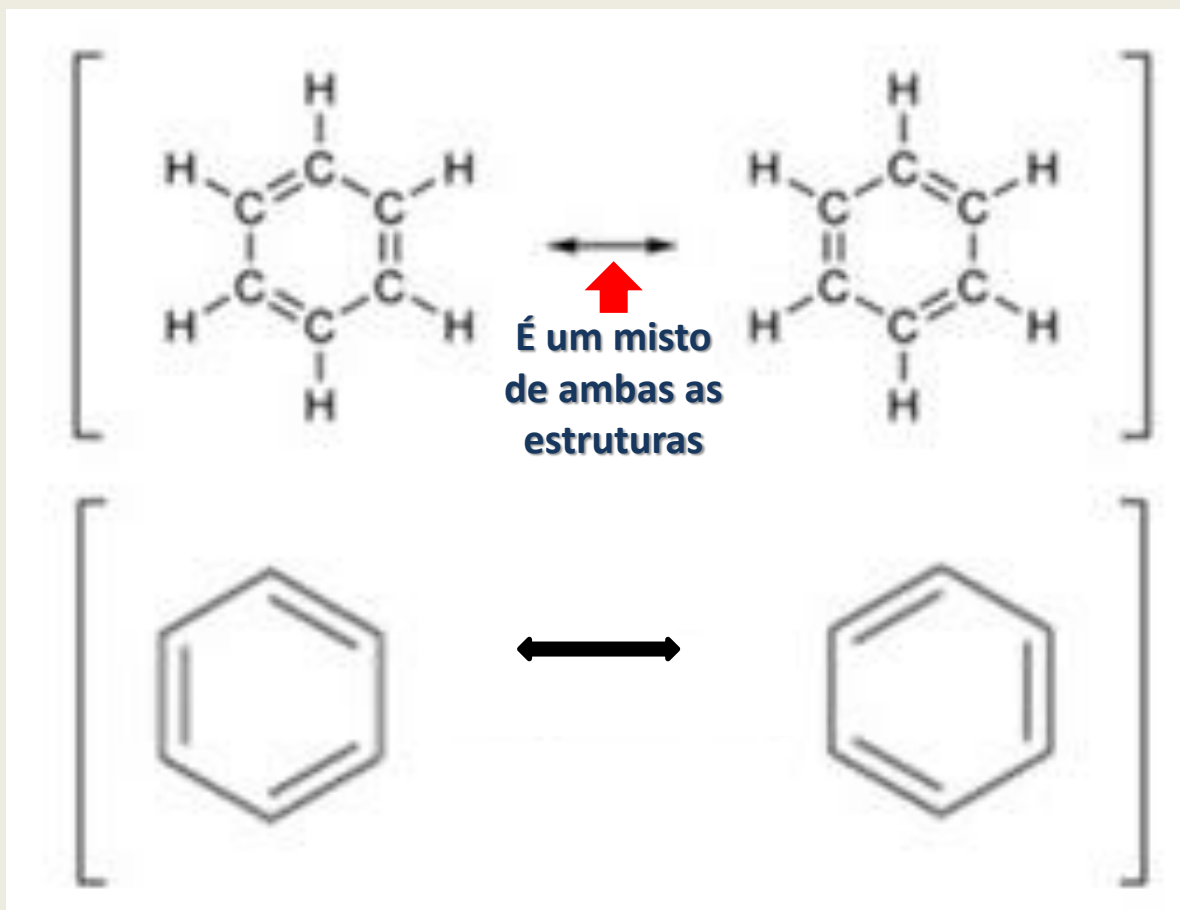


Distância de uma ligação simples – 1,54 Å
Distância de uma ligação dupla – 1,34 Å



Ressonância

É o termo usado para descrever uma situação na qual, sem mudar a posição dos átomos, podemos escrever mais de uma fórmula estrutural diferente, mudando apenas a posição de alguns elétrons.

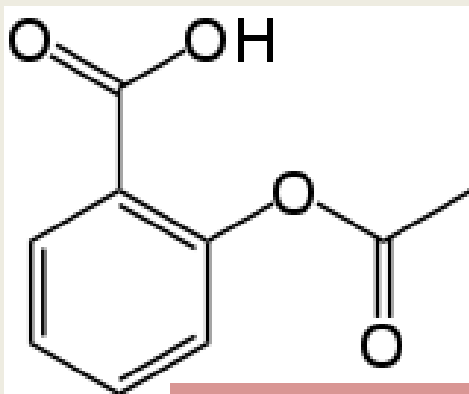


Compostos Aromáticos

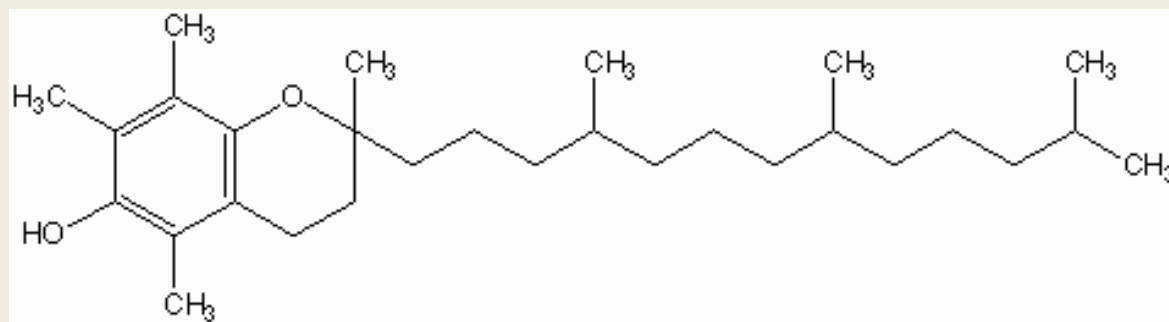
Substâncias que têm anel aromático na sua estrutura são chamados compostos aromáticos.

O anel benzênico também é chamado de anel aromático.

Exemplo:



Ácido
Acetilsalicílico

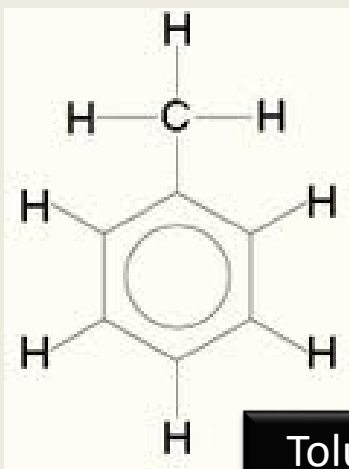


Vitamina E - Tocoferol

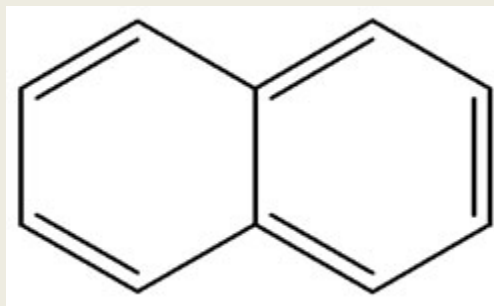
-Em condições ambientes: são encontrados na fase líquida ou gasosa;

- Existem em grande quantidade na natureza e são essenciais na indústria de inseticidas, de corantes, como solventes e para fabricar explosivos.

Na indústria, por exemplo, existe o **TOLUENO** (metilbenzeno) que é muito perigoso. Ele é utilizado na produção de colas, popularmente conhecidas como *cola de sapateiro*.



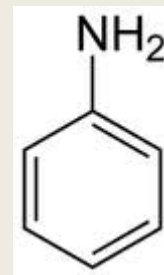
Tolueno



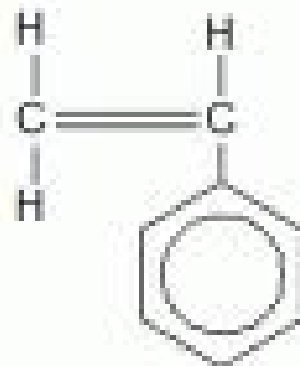
Naftalina

-Encontrado:

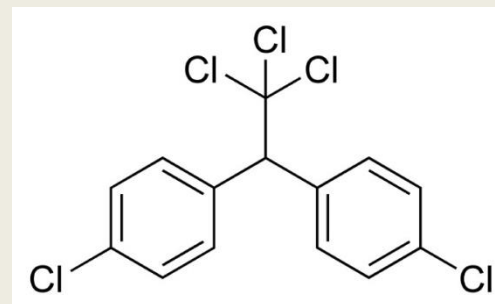
- combustíveis fósseis
- Corantes - anilina
- Fibras têxteis
- Conservante de alimentos
- Plásticos – estirenos
- Fenol – resinas e adesivos
- Medicamentos
- Inseticidas
- Tintas



Anilina



Estireno



DDT

(Dicloro difenil tricloroetano)

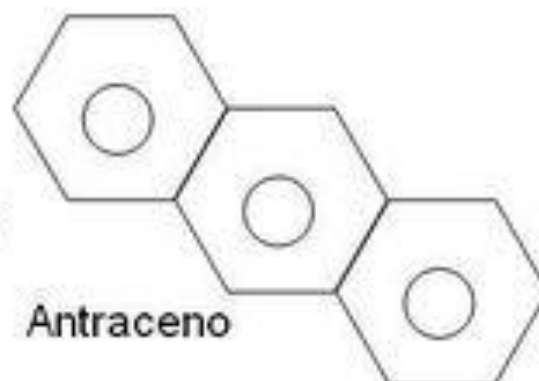
Alguns hidrocarbonetos aromáticos:



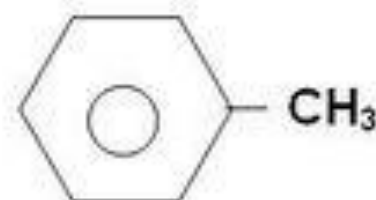
Benzeno



Naftaleno



Antraceno

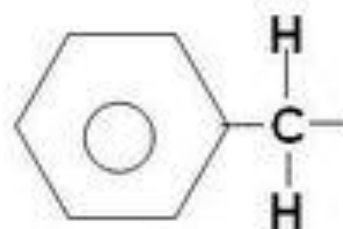


Tolueno

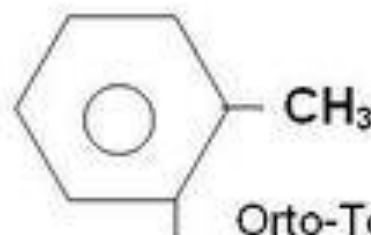
e radicais aromáticos:



Fenil



Benzil

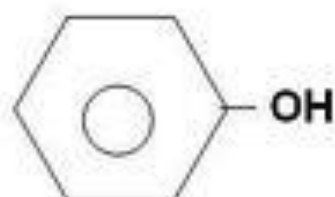


Orto-Toluil



α -Naftil

Função Fenol:



Fenol ou Hidróxi-benzeno



Para-metil-fenol ou
1-hidróxi-4-metil-benzeno