

## **1. Grupos Funcionais e Representação de Moléculas Orgânicas**

Leitura Recomendada:

*Organic Chemistry*, J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers,  
Oxford, Oxford, 2001, cap. 1 e 2.

### **1.1. Definição e Importância da Química Orgânica**

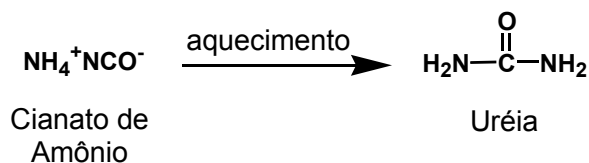
Química Orgânica é a química dos compostos de carbono, os quais são chamados de moléculas orgânicas.

#### ✓ 1780: Vitalismo

- Compostos orgânicos: compostos que poderiam ser obtidos a partir de organismos vivos. Uma “força vital” era necessária para a síntese de um composto orgânico;
- Compostos inorgânicos: originados de fontes não-vivas, como minerais;
- Considerava-se que um composto inorgânico não podia ser transformado em um orgânico pelo homem.

✓ 1828-1850: Síntese de compostos orgânicos a partir de compostos inorgânicos.

✓ Síntese da ureia por Wöhler em 1828:



✓ Vitalismo atual (!?!): “Vitaminas Orgânicas”, “Alimentos Orgânicos”

- Vitamina C “natural” é melhor do que a produzida no laboratório (sintética)?
- Produtos sem “química”

### Fonte de Moléculas Orgânicas

✓ Obtidos diretamente na natureza:

- Petróleo, carvão, plantas e animais
- Destas fontes são obtidas tanto moléculas “simples” quanto muito complexas. As simples são utilizadas como blocos de construção de moléculas maiores e/ou mais complexas.

✓ Síntese:

- A partir de compostos inorgânicos
- A partir de compostos orgânicos

✓ Mais de 22 milhões de compostos orgânicos são conhecidos (2003)

✓ Taxa de Crescimento: cerca de 0,5 milhão/ano

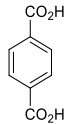
**Bulk chemicals**  
**VS**  
**Fine chemicals**

**Os 25 produtos químicos mais produzidos nos Estados Unidos, 1995** • DADOS DO CHEMICAL & ENGINEERING NEWS, 24 DE JUNHO, 1996

Ordem	Nome	Produção (bilhões de kg)	Processo de Fabricação	Emprego Terminal
1	Ácido sulfúrico	43,3	Combustão de enxofre a SO <sub>2</sub> , oxidação de SO <sub>2</sub> a SO <sub>3</sub> , reação com água. Também recuperado da extração de metais.	Fertilizantes, refinação de petróleo, metalurgia e indústria química.
2	Nitrogênio	30,9	Destilação do ar líquido	Atmosferas protetoras em metalurgia e eletrônica, agente de congelação de alimentos; produção de amônia.
3	Oxigênio	24,3	Destilação do ar líquido	Produção de aço, fabricação de metais e processamento químico.
4	Etileno	21,3	Craqueamento de hidrocarbonetos do petróleo e do gás natural.	Plásticos, anticongelantes, fibras e solventes.
5	Óxido de cálcio (cal)	18,7	Calcinação do calcário (CaCO <sub>3</sub> )	Produção de aço, tratamento de água, refratários, indústria de polpa e papel.
6	Amônia	16,2	Reação catalítica entre nitrogênio, ar e hidrogênio.	Fertilizantes, plásticos, fibras e resinas.
7	Ácido fosfórico	11,9	Reação entre ácido sulfúrico e rocha fosfática; queima de fósforo elementar e dissolução em água.	Fertilizantes, detergentes e compostos para tratamento de água.
8	Hidróxido de sódio	11,9	Eletrolise de NaCl dissolvido em água	Produtos químicos, polpa e papel, alumínio, têxteis e refinação de óleo
9	Propileno	11,7	Craqueamento de petróleo e de produtos de petróleo	Plásticos, fibras e solventes
10	Cloro	11,4	Eletrolise de NaCl, recuperação de usuários de HCl	Indústria química, plásticos, solventes, polpa e papel
11	Carbonato de sódio	10,1	Minério natural trona; reação entre o NaCl, calcário e amônia	Indústria de vidro, indústrias químicas, papel e polpa de celulose
12	Metil- <i>tert</i> -butil éter	8,0	Reação com catalise ácida entre o metanol e o isobuteno	Aditivo de gasolina

13	Dicloreto de etileno	8,0	Cloração do eteno	Produção de cloreto de vinila
14	Ácido nítrico	7,8	Oxidação da amônia a dióxido de nitrogênio, que é então dissolvido em água	Fertilizantes de nitrato e fosfato de amônio, explosivos nitrados, plásticos, corantes e vernizes
15	Nitrato de amônio	7,3	Reação entre amônia e ácido nítrico	Explosivos, fertilizantes, gás hilarante, fósforos
16	Benzeno	7,2	Extraído de petróleo e do alcatrão de carvão	Poliestireno, resinas, náilon e borracha
17	Uréia (NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> CO	7,1	Reação entre NH <sub>3</sub> e CO <sub>2</sub> sob pressão	Fertilizantes, rações animais, adesivos e plásticos
18	Cloreto de vinila	6,8	Desidrocloreção do dicloreto de eteno	Polímeros, filmes, revestimentos e moldes
19	Etilbenzeno	6,2	Alquilação de benzeno	Produção de estireno
20	Estireno	5,2	Desidrogenação do etilbenzeno	Polímeros, borracha, poliésteres
21	Metanol	5,1	Do gás natural. Oxidação do metano a CO e H <sub>2</sub> ; conversão catalítica a álcool	Polímeros e adesivos, combustível
22	Dióxido de carbono	4,9	Combustão de hidrocarbonetos, decomposição de calcário	Produção de uréia, carbonato de sódio, bebidas; extintores de incêndio
23	Xileno	4,3	Reforma catalítica de hidrocarbonetos do petróleo	Gasolinas de alta octanagem, resinas de uretana, solventes, intermediário na fabricação de TNT, benzaldeído e ácido benzóico
24	Formaldeído	3,7	Oxidação do metanol	Adesivos, plásticos
25	Ácido tereftálico	3,6	Oxidação ao ar do <i>p</i> -xileno em ácido acético	Fibras de poliéster, filmes e resinas

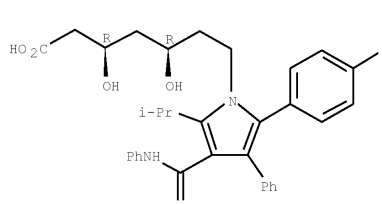
  



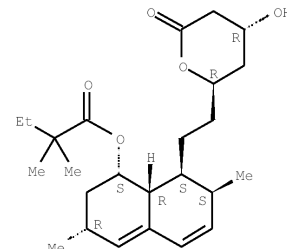
Ácido Tereftálico

### Fármacos mais Vendidos

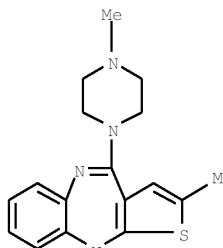
Fonte: [http://www.forbes.com/technology/2004/03/16/cx\\_mh\\_0316bestselling.html](http://www.forbes.com/technology/2004/03/16/cx_mh_0316bestselling.html)



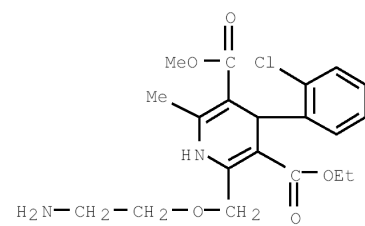
Lipitor (Pfizer), reduz colesterol, 10,3 Bilhões



Zocor (Merck), reduz colesterol, 6,1 Bilhões

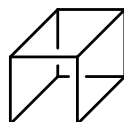


Ziprexa (Eli Lilly), anti-  
psicótico, 4,8 Bilhões



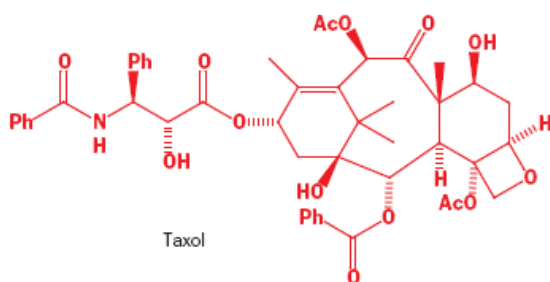
Norvasc (Pfizer), reduz pressão  
sanguínea, 4,1 Bilhões

**Moléculas Orgânicas com Interesse Teórico**



Cubano

**Taxol**



1962: Isolado das cascas da árvore *Taxus brevifolia* (florestas da costa do pacífico dos EUA)

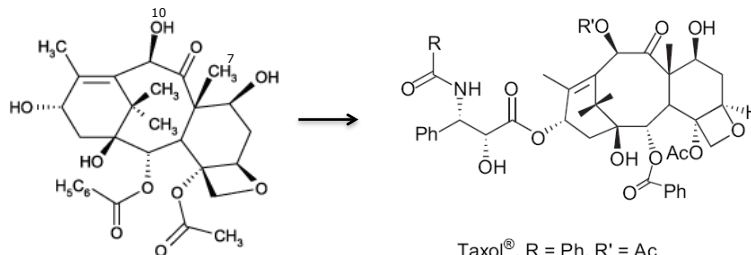
1992: Aprovado pelo FDA americano no tratamento de câncer de ovário.

1994: 1ª síntese total: Holton e colaboradores, *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, *116*, 1599.

Faturamento atual: US\$ 2 bilhões/ano.

### Semi-síntese

- ✓ Comum para moléculas estruturalmente complexas derivadas de produtos naturais. É importante na indústria.
- ✓ Parte-se de um produto natural com esqueleto complexo já definido.
- ✓ Exemplo - Transformação da 10-Deacetil Bacatina III no Taxol:



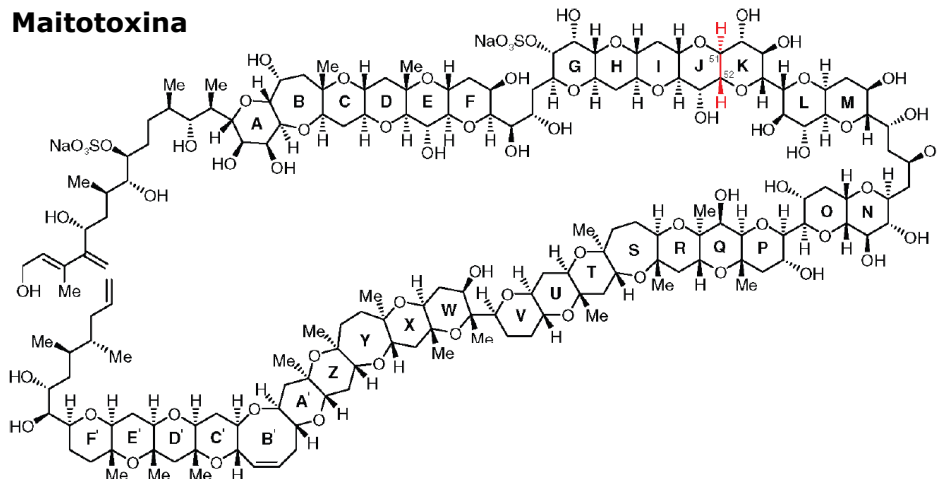
Taxol<sup>®</sup>, R = Ph, R' = Ac  
Taxotere<sup>®</sup>, R = *t*-Bu, R' = H

1 g/Kg

*Taxus baccata* L. (Taxaceae)

O sacrifício de uma árvore de 100 anos levaria a cerca de 300 mg de taxol, o que daria para uma única dose para um paciente com câncer.

### Maitotoxina



“Marine Huge Molecules: the Longest Carbon Chain in Natural Products”, Kita e Uemura, *Chemical Record* **2010**, 10, 48.

Estudos visando à síntese: Nicolaou et al., *Journal of the American Chemical Society* **2011**, 133, 214, 220; **2010**, 132, 9900, 6855, **2008**, 130, 7466.

