

QFL0341 - Estrutura e Propriedades de Compostos Orgânicos - Noturno (2019)

Massuo Jorge Kato

Laboratório de Química de Produtos Naturais

Bloco 11 térreo, sala 1124

massuojorge@gmail.com

3091-1886

Material: STOA-USP

QFL0137 – Química geral

Programa Resumido

Substâncias puras e misturas. Solubilidade. Estudo de soluções. Estequiometria e unidades de concentração. Tipos de reações químicas: ácidos-base, oxido-redução, complexação e precipitação. Estrutura atômica. Configuração eletrônica dos elementos. Propriedades periódicas. Ligação química: iônica, covalente. Interações intermoleculares.



Conexões com a Estrutura e Propriedades de Compostos orgânicos

QFL0341 Programa Resumido (2019)

1. Contextualização acerca da importância histórica e atual da Química Orgânica.
2. Grupos Funcionais, Nomenclatura e Representação de Moléculas Orgânicas.
3. Geometria de moléculas orgânicas.
4. Ligações Químicas Localizadas em Moléculas Orgânicas (hibridização sp^3 , sp^2 e sp).
5. Ligações Químicas Deslocalizadas em Moléculas Orgânicas (Ressonância, Tautomerismo, Aromaticidade e Anti-Aromaticidade).
6. Propriedades Físico-Químicas.
7. Noções básicas de espectroscopia e espectrometria de compostos orgânicos (UV, IV, RMN, EM). (introduzido nesse semestre)
8. Análise Conformacional
9. Estereoquímica
10. Ácidos e Bases em Química Orgânica.

Programa Resumido (QFL0342) Reatividade de compostos orgânicos

1. **Considerações Gerais sobre Reações Orgânicas** (Cinética vs. Termodinâmica, Intermediários Reativos em Química Orgânica, Reações Estereosseletivas e Estereoespecíficas, Postulado de Hammond).
2. **Reações de Adição Eletrofílica**: adição eletrofílica de halogênios, HX e água em alcenos e alcinos, hidrogenação, hidroboração/oxidação, oximercuriação/desmercuriação, epoxidação, ozonólise e di-hidroxilação.
3. **Reações de Adição Nucleofílica**: reatividade relativa de aldeídos e cetonas, adição de água, HCN, hidretos e carbânions a compostos carbonílicos.
4. **Reações de Adição-Eliminação**: reatividade relativa de ácidos carboxílicos e derivados, reação de compostos carbonílicos e carboxílicos com água, álcoois e aminas.
5. **Reações de Substituição e de Eliminação**: substituição nucleofílica alifática (SN1, SN2), eliminação 1,2 (E1, E2, E1CB) para formação de alcenos e alcinos.
6. **Reações de Substituição Eletrofílica Aromática**: mecanismo e aplicações da substituição eletrofílica aromática (SEAR); nitração, sulfonação, halogênio, alquilação e acilação, métodos sintéticos.
7. **Reações Radicais**; reações de halogenação radicalar de alcanos; reações de adição radicalar a insaturações (adição radicalar de HBr a C=C, polimerização radicalar).

Literatura

- 1) A. BURROWS, J. HOLMAN, A. PARSONS, G. PILLING, G. PRICE – Chemistry³ - Introducing inorganic, organic and physical chemistry, 3rd ed Oxford, 2017.
- 2) P. Y. BRUICE - Organic Chemistry, Prentice Hall, 4^a ed., 2004.
- 3) J. McMURRY - Química Orgânica, Thomson, 6^a ed., 2005.
- 4) T. W. G. SOLOMONS, C. B. FRYHLE - Organic Chemistry, John Wiley & Sons, 8^a Ed., 2004.
- 5) K. PETER C. VOLLHARDT, NEIL E. SCHORE, W. H. FREEMAN, Organic Chemistry: Structure and Function, 5th edition, 2005.
- 6) J. CLAYDEN, S. WARREN, N. GREEVES, P. WOTHERS - Organic Chemistry, Oxford University Press, 2001.
- 7) Espectroscopia e espectrometria: Livros de química orgânica
- 8) R. M. SILVERSTEIN, G. C. BASSLER, T. C. MORRIL; “Spectrometric Identification of Organic Compounds”, 5a Ed., John Willey & Sons, 1991.
- 9) D. H. WILLIAMS, I. FLEMING, “Spectroscopic Methods in Organic Chemistry”, 4a Ed., McGraw-Hill, 1989.

Cronograma

MÊS / DIA	ASSUNTO
AGOSTO	
02	Apresentação da disciplina. Contextualização acerca da importância histórica e atual da Química Orgânica.
06	Ligações químicas e grupos funcionais. Nomenclatura e representação de moléculas orgânicas. Hidrocarbonetos (alcanos, alcenos e acetilenos) 1ª Lista de exercícios.
09	Nomenclatura e representação de hidrocarbonetos. Estabilidade de espécies reativas derivadas de hidrocarbonetos saturados e insaturados. 2ª Lista de exercícios.
13	Métodos físico-químicos de caracterização de hidrocarbonetos (EM-espectrometria de massas). 3ª Lista de exercícios.
16	Estruturas, nomenclatura e caracterização (EM) de álcoois, cetonas, ácidos carboxílicos. Outros grupos funcionais.
20	Métodos físico-químicos de caracterização de grupos funcionais (Infravermelho). 4ª Lista de exercícios.
23	Discussão de exercícios.
27	Ligações deslocalizadas. Conjugação e híbridos de ressonância. 5ª Lista de exercícios.
30	Discussão de exercícios.
SETEMBRO	
03 - 06	Semana da Pátria
10	PROVA (P1)

10	PROVA (P1)
13	Métodos físico-químicos de caracterização de grupos funcionais (Ultravioleta). 6ª Lista de exercícios
17	Aromaticidade e anti-aromaticidade. Métodos físico-químicos de caracterização de compostos aromáticos (Ultravioleta). 7ª Lista de exercícios
20	Aromaticidade e anti-aromaticidade
24-27	Semana da Farmácia
OUTUBRO	
01	Ressonância magnética nuclear (RMN). 8ª Lista de exercícios
04	RMN
08	Análise conformacional de compostos alicíclicos. 9ª Lista de exercícios
11	Análise conformacional de compostos cíclicos.
15	Discussão de exercícios.
18	PROVA (P2)
22 e 25	Estereoquímica. Isômeros geométricos e ópticos. 10ª Lista de exercícios
30	Configuração relativa e absoluta. Métodos de caracterização. 11ª Lista de exercícios
NOVEMBRO	
01 (02)	(Finados)
05	Acidez e basicidade. 12ª Lista de exercícios
08	Acidez e basicidade.
12	Discussão de exercícios.
15	Proclamação da República
19	Dia da Consciência Negra (não consta como feriado no Calendário USP).
22	Discussão de exercícios.
26	PROVA (P3)
30	Discussão de exercícios.
DEZEMBRO	
03	PROVA SUBSTITUTIVA
06	
08	Encerramento das aulas
11	Início do período de recuperação
	Prova de recuperação (a ser definida)

Critérios de avaliação

Média aritmética da $P1+P2+P3/3$ igual ou maior que 5,0

Prova substitutiva: substitui a menor nota

Prova de recuperação: Nota igual ou maior que 5,0

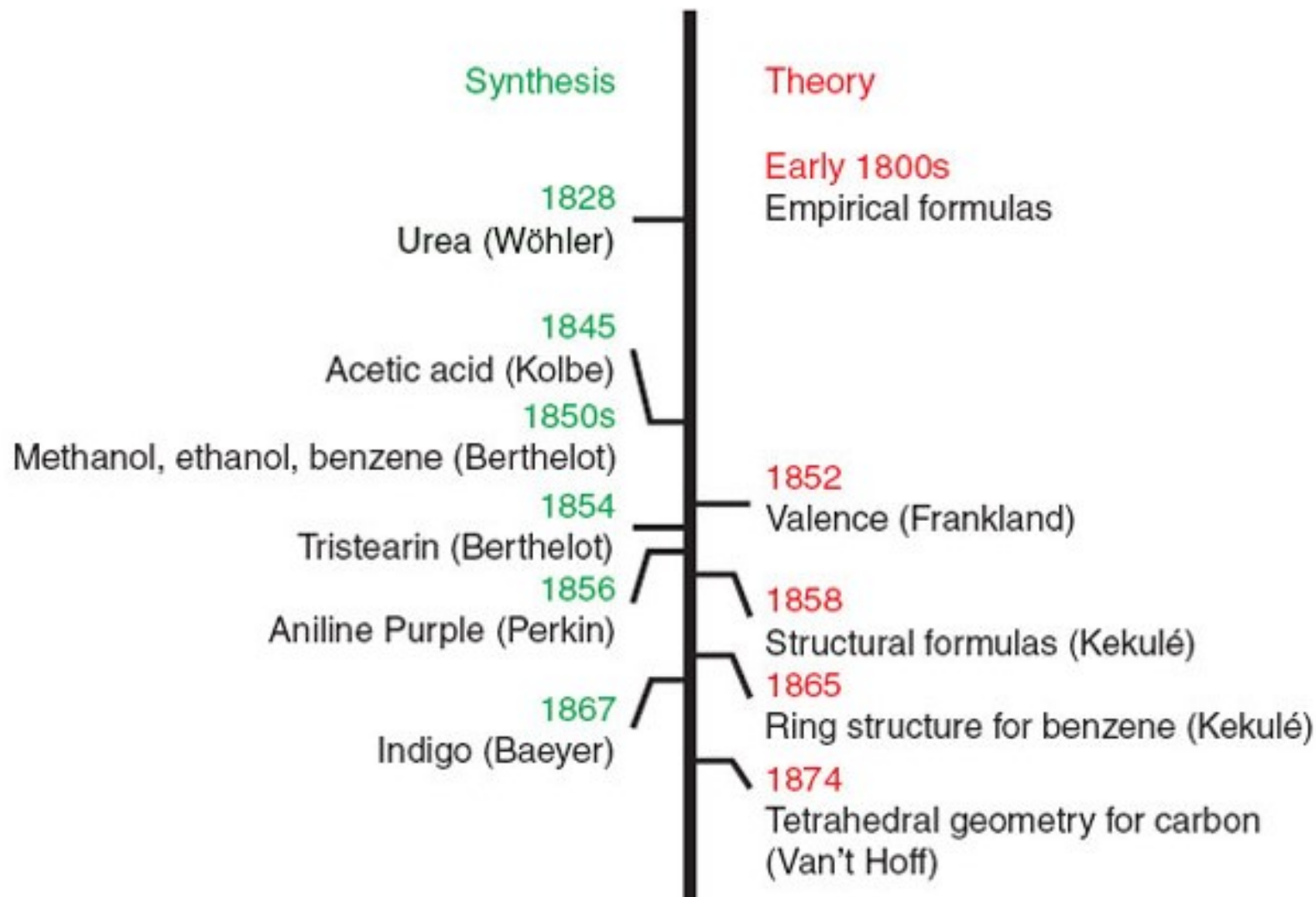
Organic chemistry: Elements of Life and their Availability

1 H												5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	
												13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	
11 Na	12 Mg			23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn			33 As	34 Se	35 Br	
19 K	20 Ca				42 Mo						48 Cd					53 I	
					74 W												

Composition in

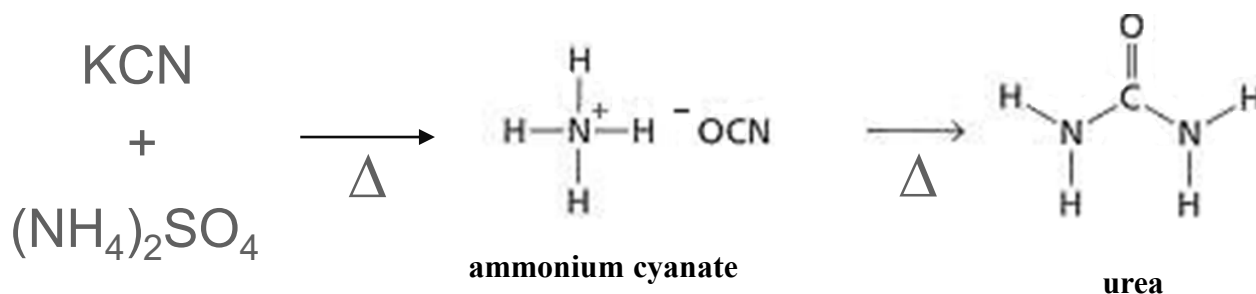
Element	Human beings (%)	Seawater (%)	Earth's crust (%)
Hydrogen	63	66	0.22
Oxygen	25.5	33	47
Carbon	9.5	0.0014	0.19
Nitrogen	1.4	<0.1	<0.1
Calcium	0.31	0.006	3.5
Phosphorus	0.22	<0.1	<0.1
Chloride	0.03	0.33	<0.1
Potassium	0.06	0.006	2.5
Sulfur	0.05	0.017	<0.1
Sodium	0.03	0.28	2.5
Magnesium	0.01	0.003	2.2
Silicon	<0.1	<0.1	28
Aluminum	<0.1	<0.1	7.9
Iron	<0.1	<0.1	4.5
Titanium	<0.1	<0.1	0.46
All others	<0.1	<0.1	<0.1

Desenvolvimento da química orgânica



The death of vitalism and the birth of organic chemistry

1823 Wöhler finished his study of medicine in Heidelberg and went to Sweden to study chemistry with **Berzelius** in Stockholm.

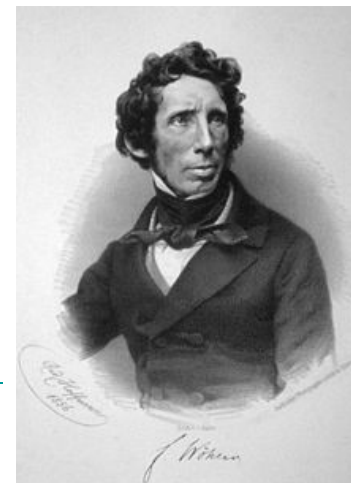


First report of isomerism

Wöhler (at 27 years old) tried to obtain ammonium cyanate from potassium cyanide and ammonium sulfate

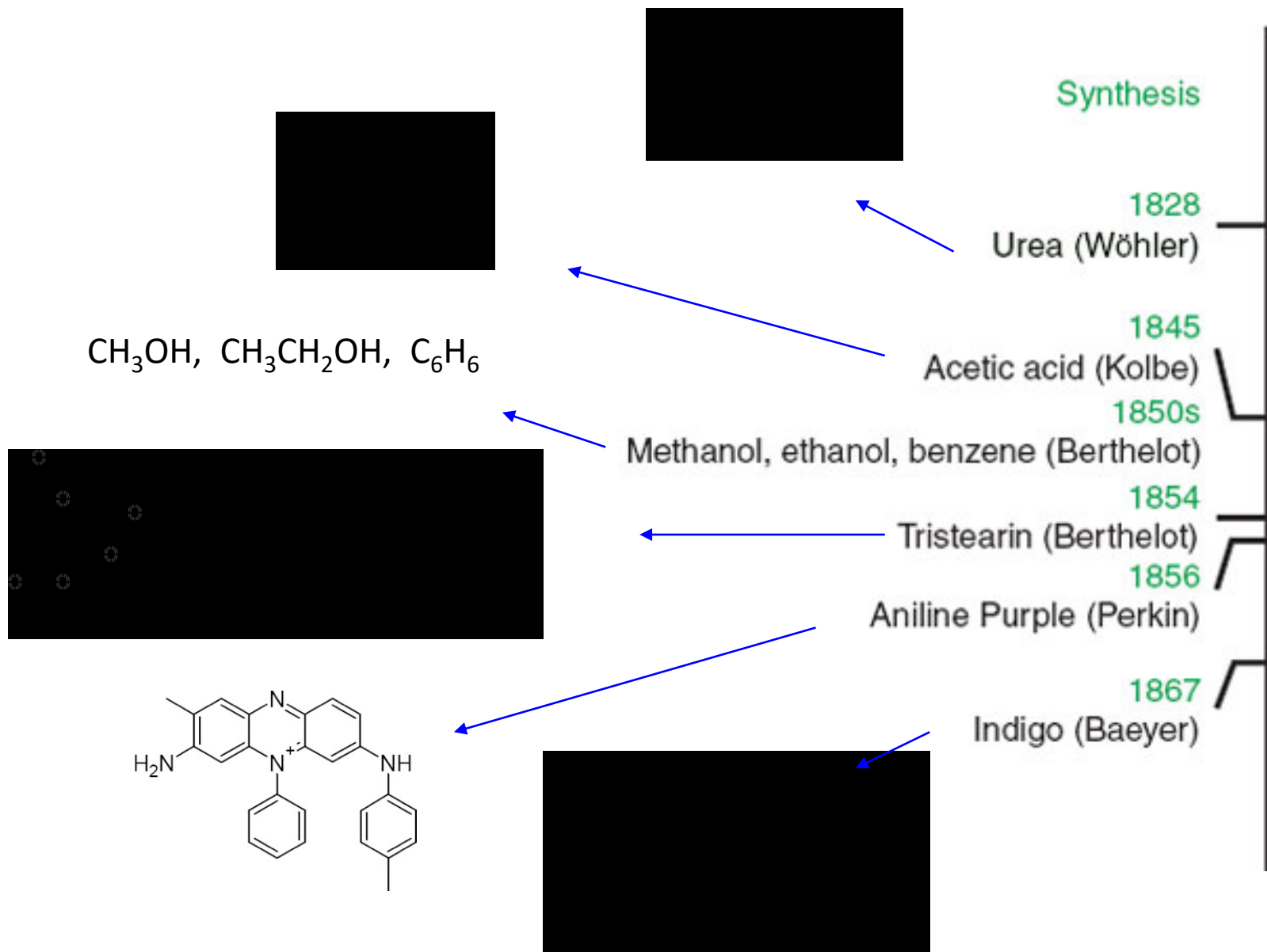
Berzelius and Wöhler placed more emphasis upon the aspect of isomerism than upon the impact it might have on the vitalism theory

1828: Friedrich Wöhler

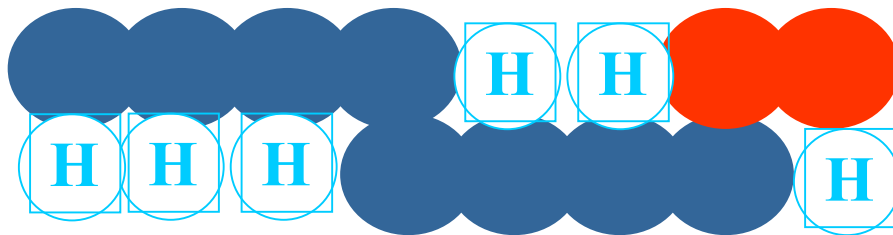
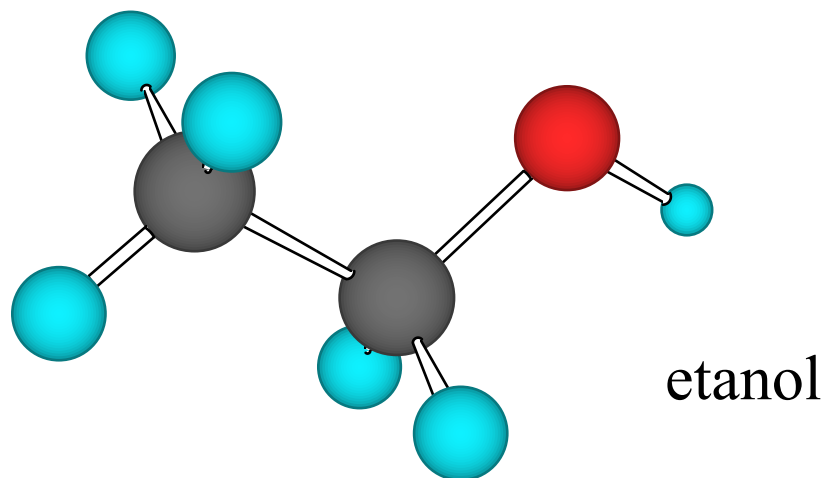


Friedrich Wöhler
(31 July 1800 – 23 September 1882)
Lithographie von Rudolf Hoffmann, 1856

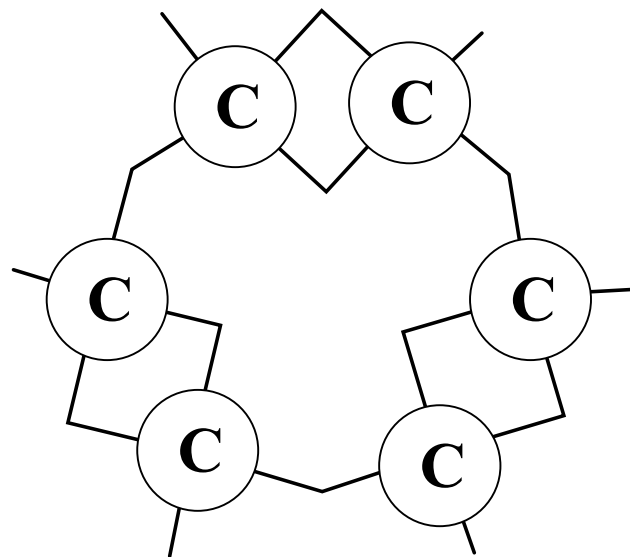
Desenvolvimento da química orgânica



1858-1861: Teoria Estrutural (Kekulé 1829-1869);



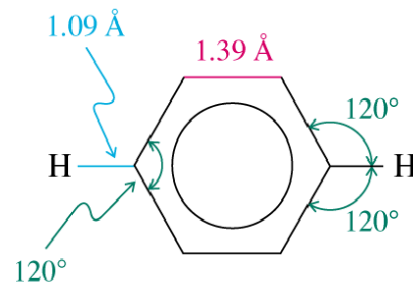
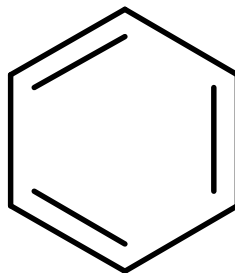
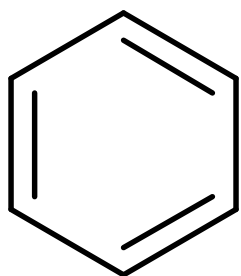
Fórmula estrutural de Kekule para o etanol



Fórmula estrutural de Kekule para o benzeno

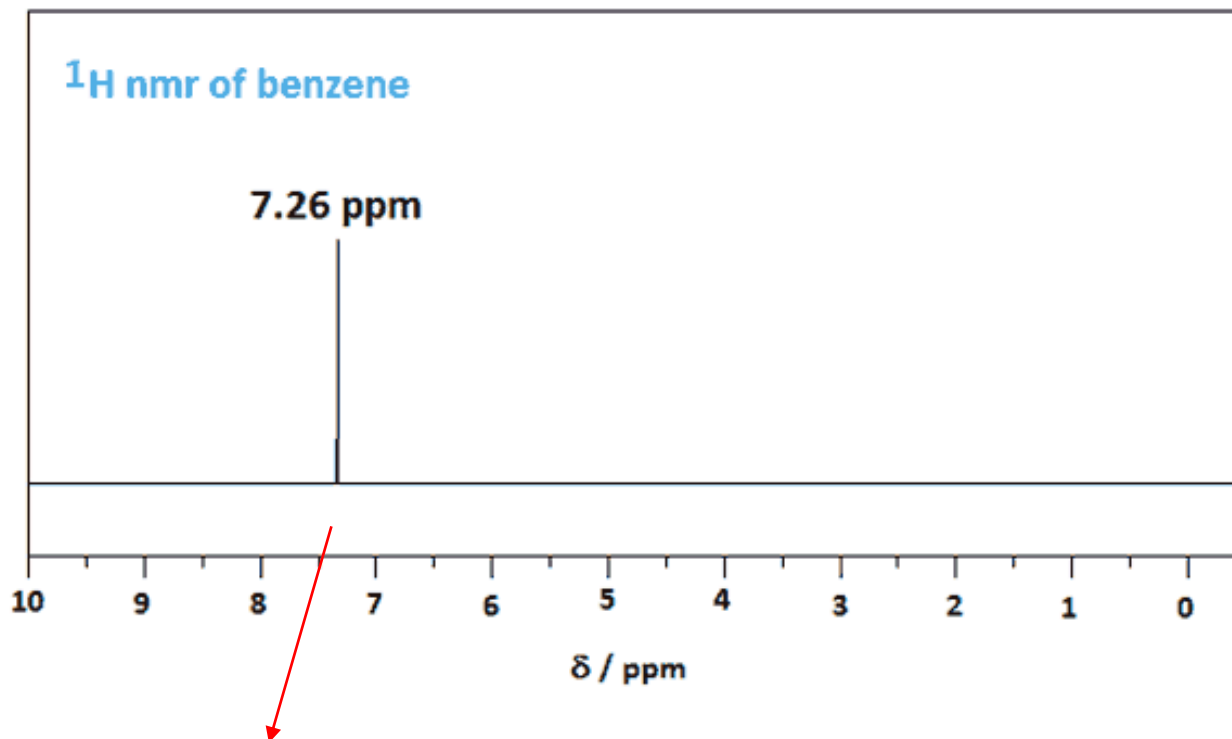
Estrutura do Benzeno como conhecemos atualmente

Híbrido de ressonância:



- ✓ As ligações carbono-carbono no benzeno não são ligações nem simples nem duplas.
- ✓ Molécula do benzeno é planar e todas as ligações C-C possuem o mesmo comprimento.
- ✓ O conceito original da palavra aromático mudou com o tempo. Atualmente, este termo refere-se a moléculas com uma estabilidade particular (energia de ressonância).

NMR spectrum of benzene



Only one signal:
All hydrogens are chemically and
magnetically equivalent.

Milestones

Terpenes: Otto Wallach ([Nobel Prize 1910](#)) and later by Leopold Ružička ([Nobel Prize 1939](#))

Dyes based on porphyrins (including chlorophyll and heme), by Richard Willstätter ([Nobel Prize 1915](#)) and Hans Fischer ([Nobel Prize 1930](#))

Steroids: Heinrich Otto Wieland ([Nobel Prize 1927](#)) and Adolf Windaus ([Nobel Prize 1928](#))

Carotenoids: Paul Karrer ([Nobel Prize 1937](#))

Vitamins: Paul Karrer, Adolf Windaus, Robert R. Williams, Norman Haworth ([Nobel Prize 1937](#)), Richard Kuhn and Albert Szent-Györgyi ([Nobel Prize 1938](#))

Hormones: Adolf Butenandt ([Nobel Prize 1939](#)) and Edward Calvin Kendall ([Nobel Prize 1950](#)); introduction of oral contraceptive (1960)

Alkaloids and anthocyanins: Robert Robinson ([Nobel Prize 1947](#))

Artemisinin and avermectin: [Youyou Tu](#) and William Campbell - Satoshi Ōmura ([Nobel Prize 2015](#))



<https://www.nobelprize.org/prizes/lists/nobel-prize-awarded-women/>

Number of organic compounds (discovered: 10% and synthesized: 90%)

Databases of compounds:

The CAS (Chemical Abstracts Service) database is the most comprehensive repository for data on organic compounds.

The search tool SciFinder: **23 million chemicals**.

The Beilstein database contains information on **9.8 million** substances, covers the scientific literature from 1771 to the present, and is today accessible via Reaxys.

PubChem contains **18.4 million** entries on compounds and especially covers the field of medicinal chemistry.

Number of organic compounds
(9.8 – 23 million of compounds)



Structures, names, functional groups,
physical properties,
conformation and stereochemistry

QFL0341



Physico-chemical properties

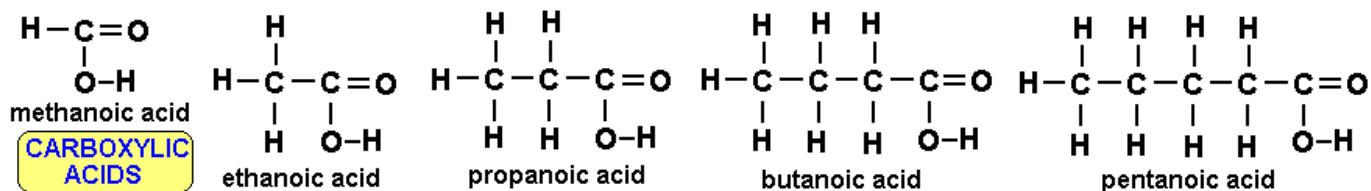
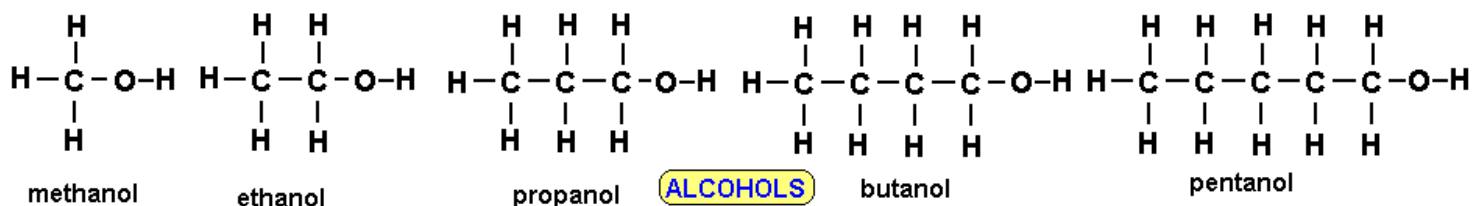
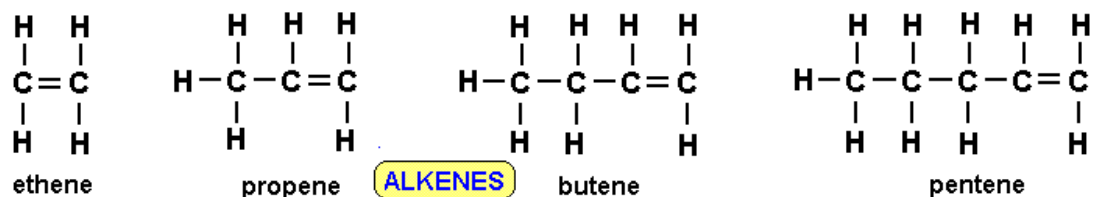
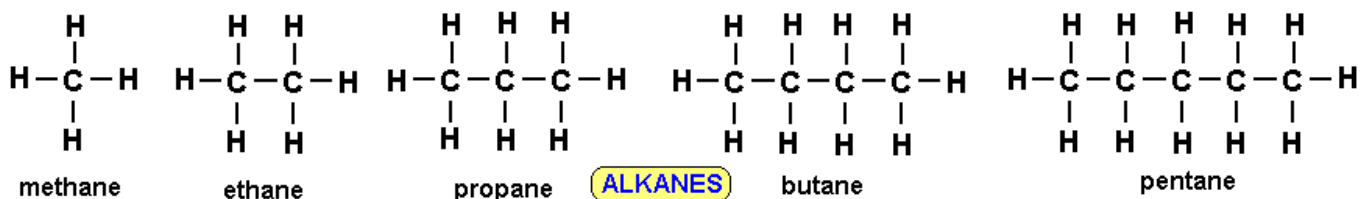
QFL314
QO exp



Reactivity and biological properties

QFL0342

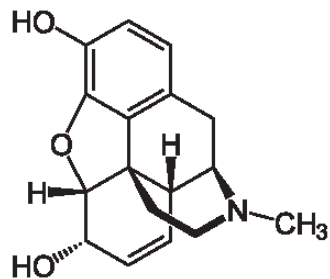
Importância da Nomenclatura de compostos orgânicos



Common unsaturated fatty acids

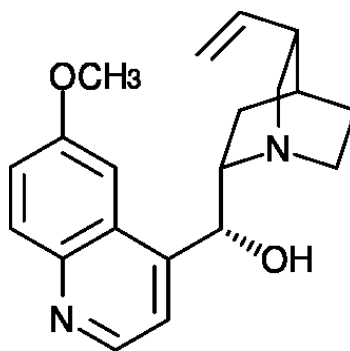
	common name	IUPAC name	melting point (C°)
16:0	palmitate	hexanodecanoate	63
16:1 Δ^9	palmitoleate	cis- Δ^9 -hexanohexanodecanoate	-0.5
18:0	stearate	octanodecanoate	70
18:1 Δ^9	oleate	cis- Δ^9 -octanodecanoate	13
18:2 $\Delta^{9,12}$	linoleate	cis- $\Delta^{9,12}$ -octanodecanoate	-9
18:3 $\Delta^{9,12,15}$	linolenate	cis- $\Delta^{9,12,15}$ -octanodecanoate	-17
20:0	arachidate	eicosadecanoate	75
20:4 $\Delta^{5,8,11,14}$	arachidonate	cis- $\Delta^{5,8,11,14}$ -octanodecanoate	-49

Early discovery of organic compounds was primarily motivated by bioactivity and their structural determination was based mostly on degradative reactions
(trivial names)

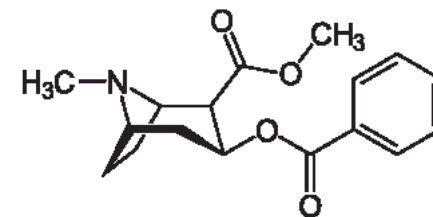


Morfina: Sertürner, 1805

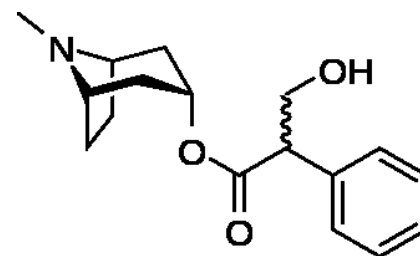
Papaver somniferum



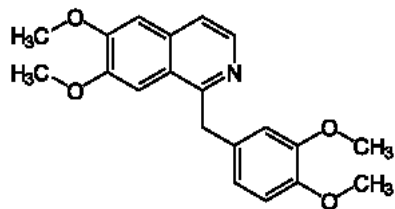
Quinina: Pelletier e
Magendie, 1820



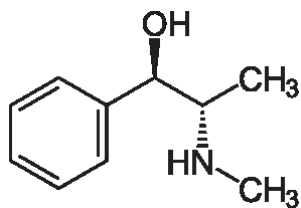
Cocaína: Wöhler, 1859.



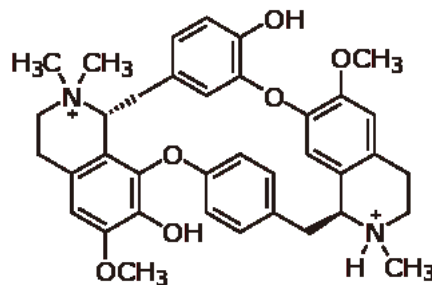
Atropina: Mein, 1831.



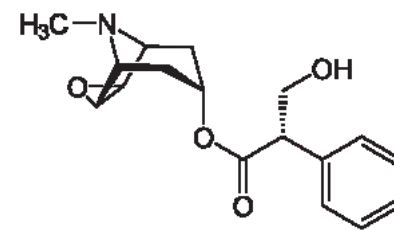
Papaverina: Merck, 1848.



Efedrina: Nagai, 1885.



Tubocurarina: Boehm, 1895.
Chondrodendron tomentosum,



Escopolamina:
Landenburg, 1881.

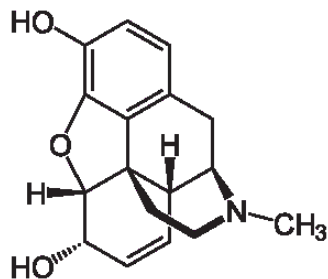


IUPAC was formed in 1919 by chemists from industry and academia, who recognized the need for international standardization in chemistry.

- Nomenclature of inorganic and organic chemistry;
- Standardization of atomic weights;
- Standardization of physical constants;
- Editing tables of properties of matter;
- Standardization of the formats of publications;
- Measures required to prevent repetition of the same papers.

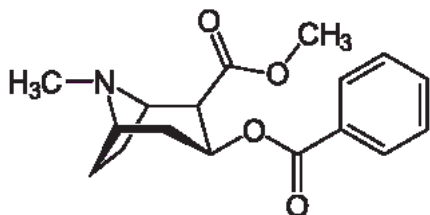
46th World Chemistry Congress - July 7 to 13, 2017 - São Paulo - Brazil
40ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química
July 9 to 14, 2017 - São Paulo - Brazil
Sustainability & Diversity through Chemistry

IUPAC names for compounds



Morfina: Sertürner, 1805

(4R,4aR,7S,7aR,12bS)-3-methyl-2,4,4a,7,7a,13-hexahydro-1H-4,12-methanobenzofuro[3,2-e]isoquinoline-7,9-diol



Cocaína: Wöhler, 1859.

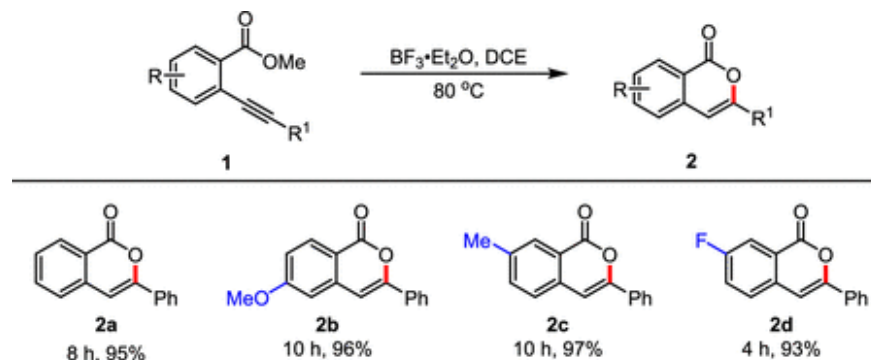
methyl (1R,2R,3S,5S)-3- (benzoyloxy)-8-methyl-8-azabicyclo[3.2.1]octane-2-carboxylate

Tipicamente como se publicam compostos orgânicos

1H-Isochromen-1-one [ACD/IUPAC Name]

Zhang et al., (2019) J. Org. Chem.
July 22; <https://doi.org/10.1021/acs.joc.9b01601>

Lactonization of 2-Alkynylbenzoates for the Assembly of Isochromenones Mediated by $\text{BF}_3 \cdot \text{Et}_2\text{O}$



3-Phenyl-1H-isochromen-1-one (2a)

Following the general procedure, **2a** was purified by silica gel chromatography (10% EtOAc/PE). Yield: 84 mg, 95%, white solid, mp. $87\text{--}88^\circ\text{C}$ (lit([36](#)) $86\text{--}87^\circ\text{C}$). ^1H NMR (600 MHz, CDCl_3) δ 8.29 (d, $J = 8.0$ Hz, 1H), 7.87 (d, $J = 7.7$ Hz, 2H), 7.70 (t, $J = 7.5$ Hz, 1H), 7.50–7.40 (m, 5H), 6.94 (s, 1H).

6-Methoxy-3-phenyl-1H-isochromen-1-one (2b)

Following the general procedure, **2b** was purified by silica gel chromatography (15% EtOAc/PE). Yield: 97 mg, 96%, pale yellow solid, mp. $165\text{--}166^\circ\text{C}$ (lit([37](#)) $165\text{--}167^\circ\text{C}$). ^1H NMR (600 MHz, CDCl_3) δ 8.22 (d, $J = 8.8$ Hz, 1H), 7.89–7.85 (m, 2H), 7.48–7.42 (m, 3H), 7.03 (dd, $J = 8.8, 2.4$ Hz, 1H), 6.89 (s, 1H), 6.87 (d, $J = 2.4$ Hz, 1H), 3.93 (s, 3H).

7-Methyl-3-phenyl-1H-isochromen-1-one (2c)

Following the general procedure, **2c** was purified by silica gel chromatography (10% EtOAc/PE). Yield: 92 mg, 97%, pale yellow solid, mp. $111\text{--}112^\circ\text{C}$ (lit([37](#)) $110\text{--}113^\circ\text{C}$). ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 8.09 (s, 1H), 7.87–7.83 (m, 2H), 7.51 (dd, $J = 8.0, 1.5$ Hz, 1H), 7.47–7.36 (m, 4H), 6.91 (s, 1H), 2.47 (s, 1H), 2.45 (s, 3H).

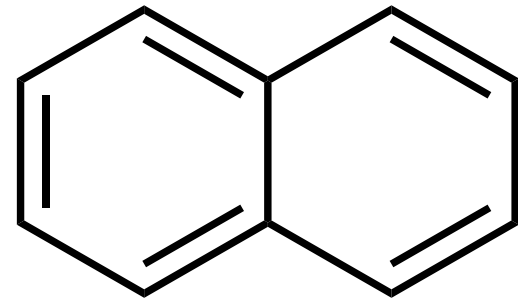
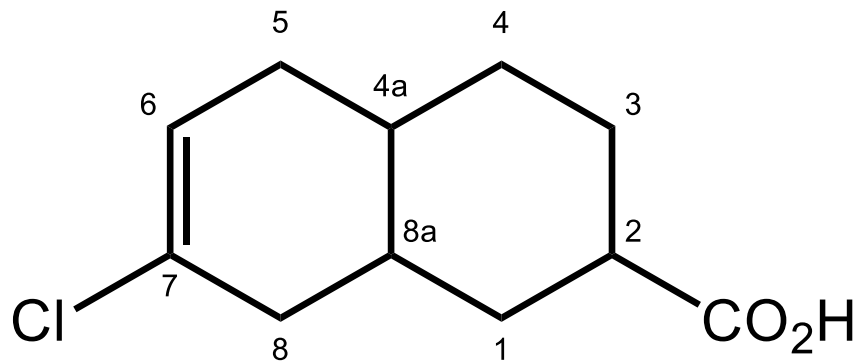
7-Fluoro-3-phenyl-1H-isochromen-1-one (2d)

Following the general procedure, **2d** was purified by silica gel chromatography (15% EtOAc/PE). Yield: 89 mg, 93%, pale yellow solid, mp. $154\text{--}157^\circ\text{C}$ (lit([36](#)) $154\text{--}156^\circ\text{C}$). ^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.96 (dd, $J = 8.5, 2.5$ Hz, 1H), 7.86 (dd, $J = 8.1, 1.5$ Hz, 2H), 7.54–7.41 (m, 5H), 6.94 (s, 1H).

Nomenclatura de compostos orgânicos

Ácido 7-cloro-1,2,3,4,4a,5,8,8a-octahidronaftaleno-2-carboxílico

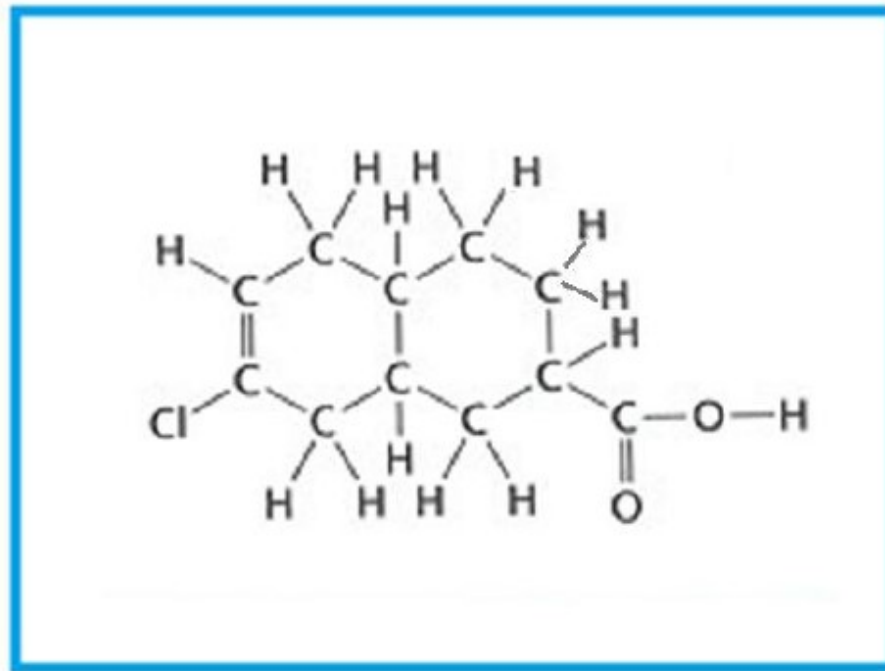
Qual é a estrutura?



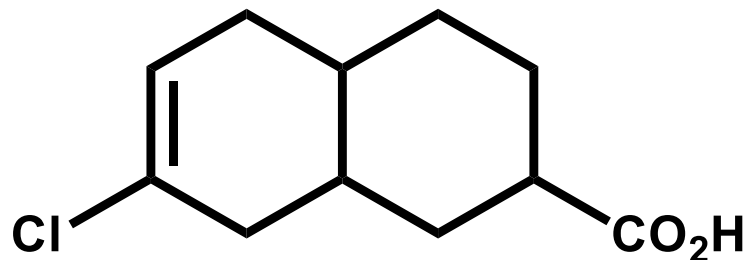
naftaleno

Octahidro= 4 ligações duplas reduzidas (8 hidrogênios)

Representação de compostos orgânicos

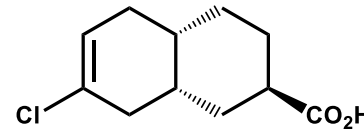
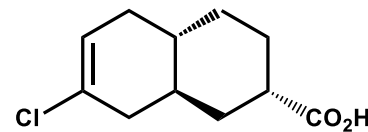
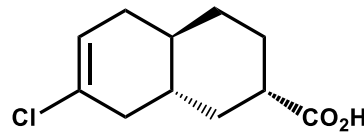
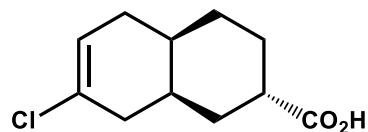
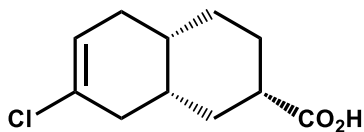
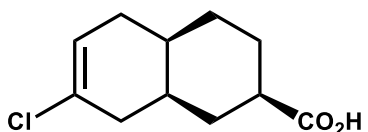


Representação de compostos orgânicos



O que falta nessa representação?

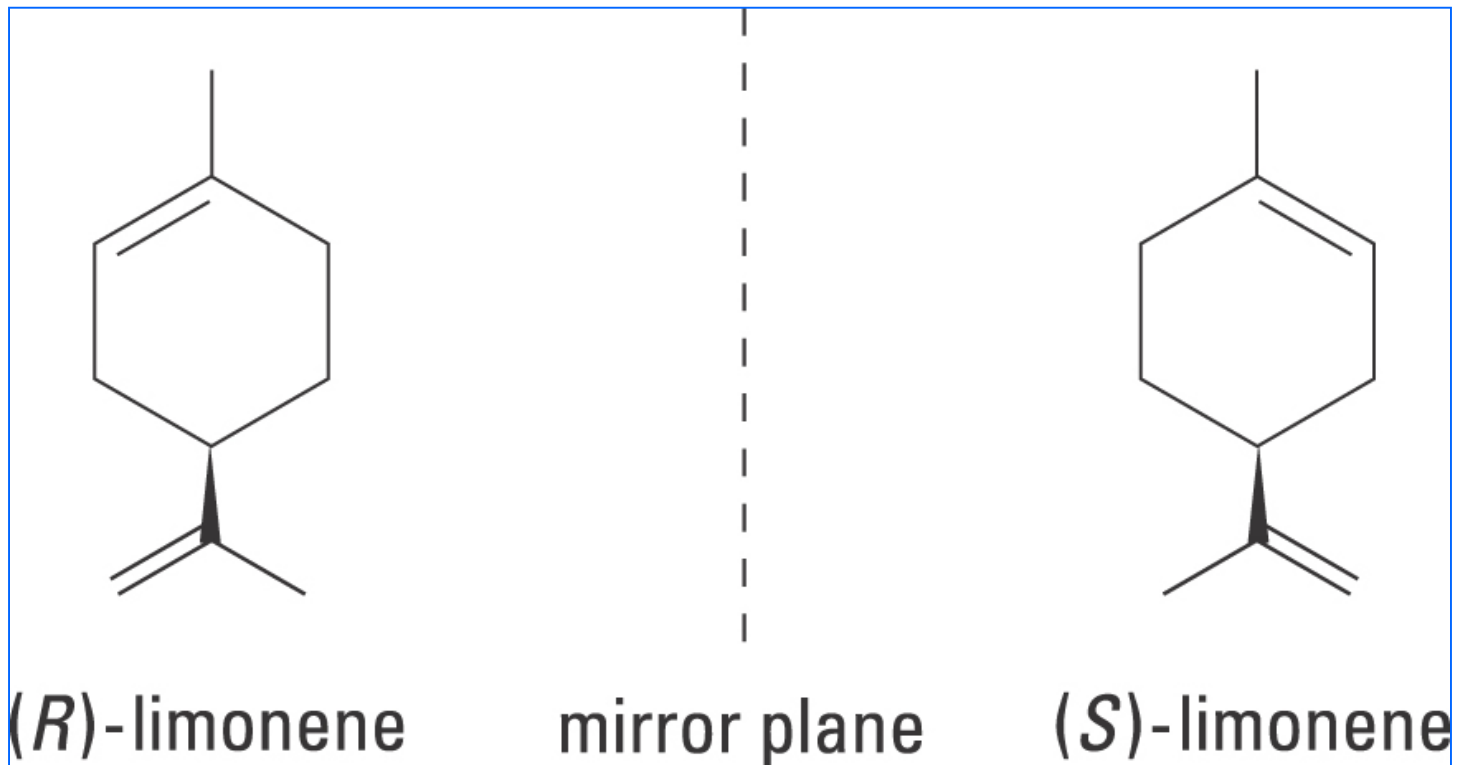
Quantos isômeros são possíveis?



Número de
Estereoisômeros:
 2^n

n = número de
carbonos quirais

**Consequências da quiralidade:
diferentes propriedades biológicas**



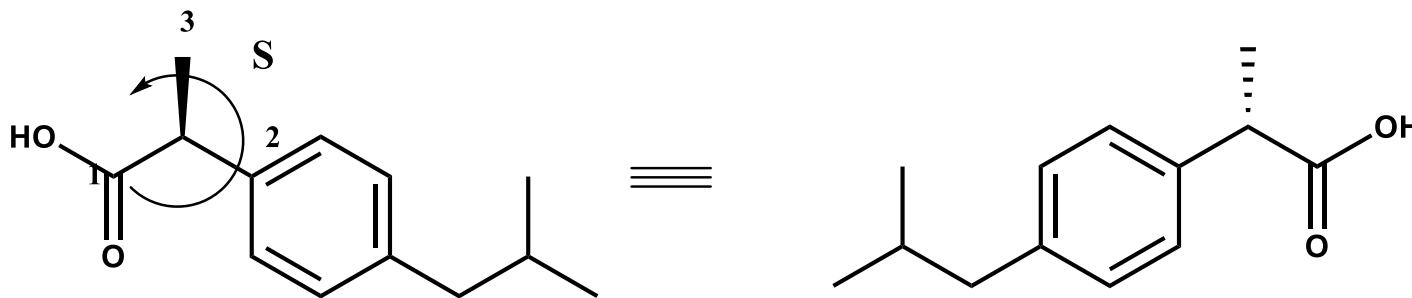
Odor de laranja

Odor de limão

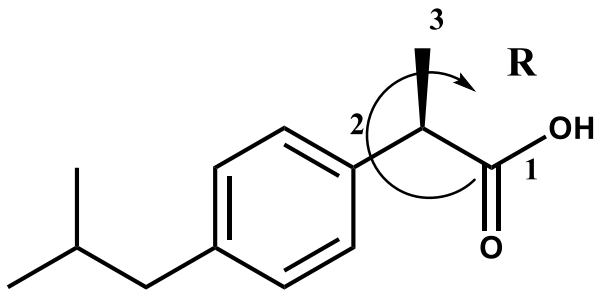
Mistura de Enantiômeros como Fármacos

Ibuprofen (Advil, Motrin, Nuprin): vendido na forma racêmica (mistura R:S (1:1))

Isômero (S): anti-inflamatório, analgésico.



Isômero (R): não tem ação.

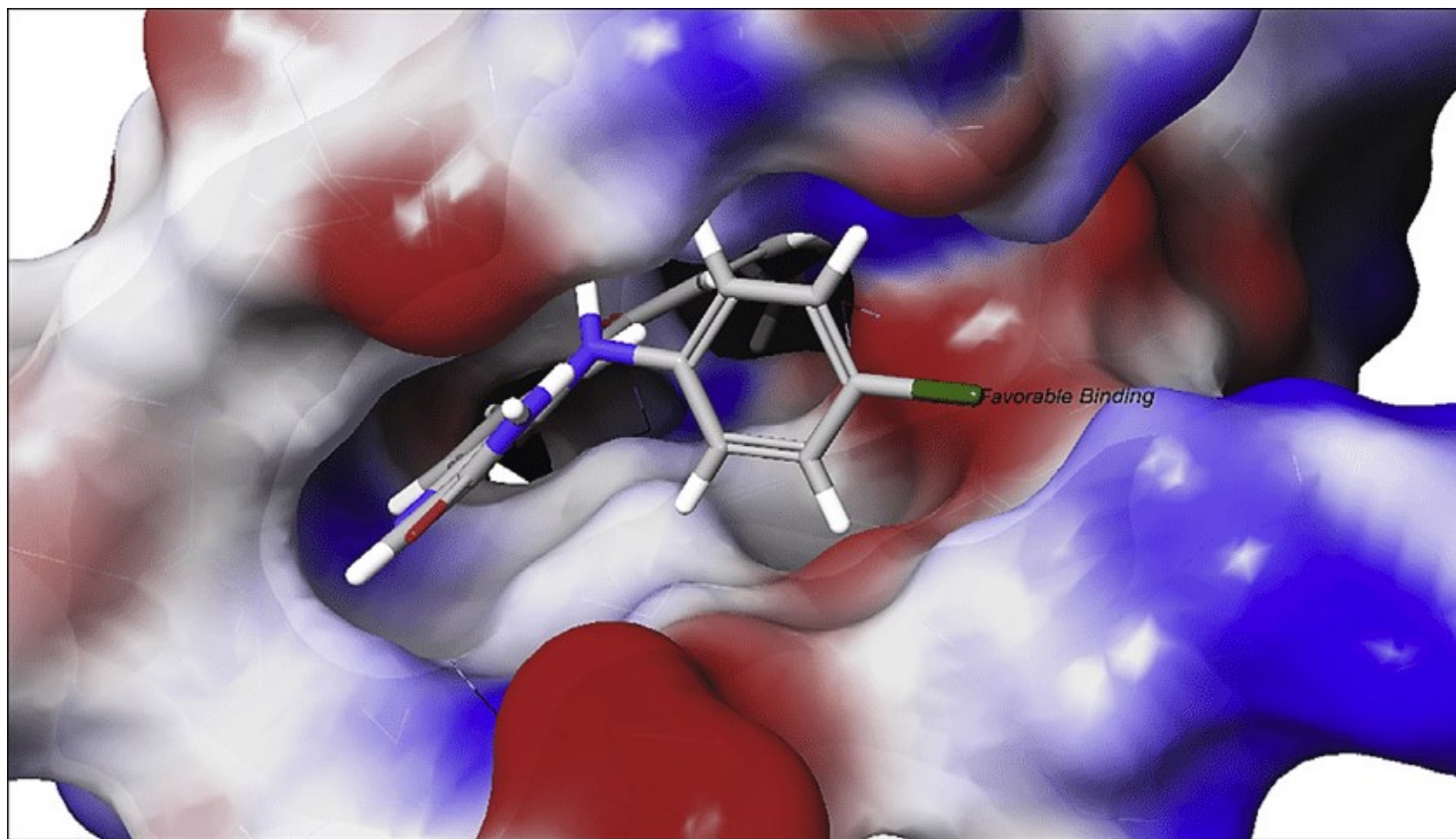


R (rectus) e S (sinister)
Sistema de nomenclatura
Introduzida por
Cahn-Ingold-Prelog
Para especificar
Configurações em
Centros estereogênicos
(carbonos quirais)

As formas R e S podem ser interconvertidas
(vide enolização de compostos carbonílicos)

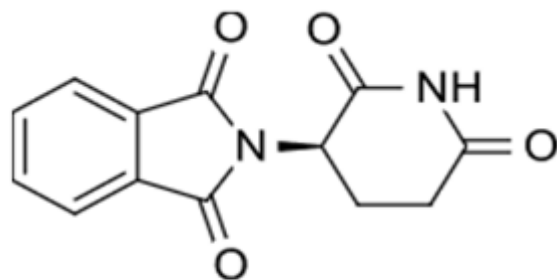
Quanto maior o
Número atômico, maior a prioridade

**Consequências da quiralidade:
diferentes propriedades biológicas
(interações com sítios receptores de forma específica)**



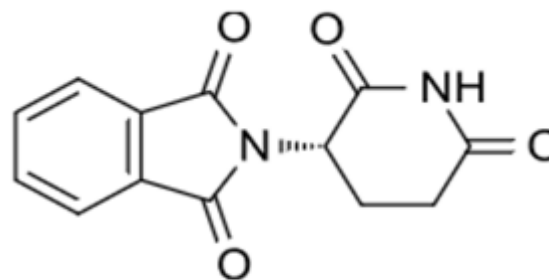
Mistura de Enantiômeros como Fármacos: desastres da humanidade

- ✓ Talidomida: A partir do final da década de 1950 foi usada na forma **racêmica** para aliviar a náusea matinal e insônia em mulheres grávidas.
- ✓ Resultado: cerca de 12.000 crianças com deformações congênitas!



(R)-thalidomide

anti-nausea and sedative drug



(S)-thalidomide

Teratogenic

Os isômeros *R* e *S* podem ser interconvertidos via enolização.

- ✓ *Agente teratogênico* tudo aquilo capaz de produzir dano ao embrião ou feto durante a gravidez

Effect of (S)-thalidomide

Browser tabs: [FAPESP] - Expiração Automática, thalidomide - Pesquisa Google

Address bar: https://www.google.com.br/search?q=thalidomide&source=lnms&tbm=isch&sa=X&ved=0ahUKEwiiivLnhs_eAhVDUJAKHZW9D6gQ_AUIDigB&biw=1920&bih=920

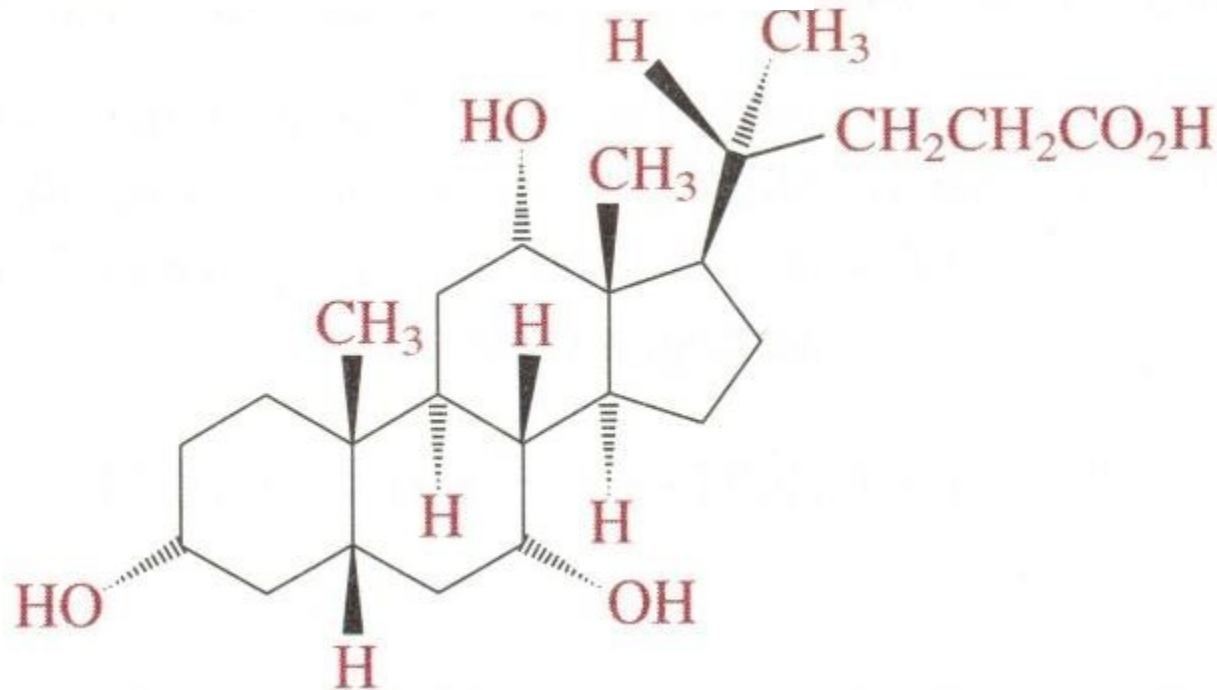
Search results include:

- Could thalidomide happen again? theconversation.com
- The Thalidomide Catastrophe by M... standard.co.uk
- My thalidomide family: Every time I wen... theguardian.com
- Children of Thalidomide - YouTube youtube.com
- The Thalidomide Tragedy: Lessons for Drug... helix.northwestern.edu
- Thalidomide link to birth defects covered up by dru... cbc.ca
- William McBride, Who War... nytimes.com
- Thalidomide - Wikipedia en.wikipedia.org
- Thalidomide babies in Spain: Supre... elpais.com
- Thalidomide victims 'betrayed' as Germa... thetimes.co.uk
- Thalidomide Manufacturer Finally Apologizes for Birth ... smithsonianmag.com
- What is thalidomide? | Thalidomide thalidomide.ca
- Thalidomide Stock Photos and Pictures... gettyimages.com
- Phillip Schofield reveals his mother was giv... express.co.uk
- Global Thalidomide Market 2018 Assessment- Pfi... incrediblenews24.com
- Thalidomide victims protest 50 years on - The Local thelocal.de
- File:Thalidomide effects.jpg - Wikipedia en.wikipedia.org
- Thalidomide: an oral history | Wellcom... blog.wellcomelibrary.org
- Thalidomide shows promise for o... mpnews.org
- Thalidomide victims launch lawsuit after 50 years | Expr... express.co.uk
- Chapter_7.ppt
- Chapter 05 Wadeppt
- Acordo_uma_pag_...docx
- afastsolicitacaoList....pdf
- Extrato_10_11_2018.pdf

Quiralidade no Mundo Biológico

Ácido Cólico: 11 estereocentros.

Número teoricamente possível de estereoisômeros: 2048 !



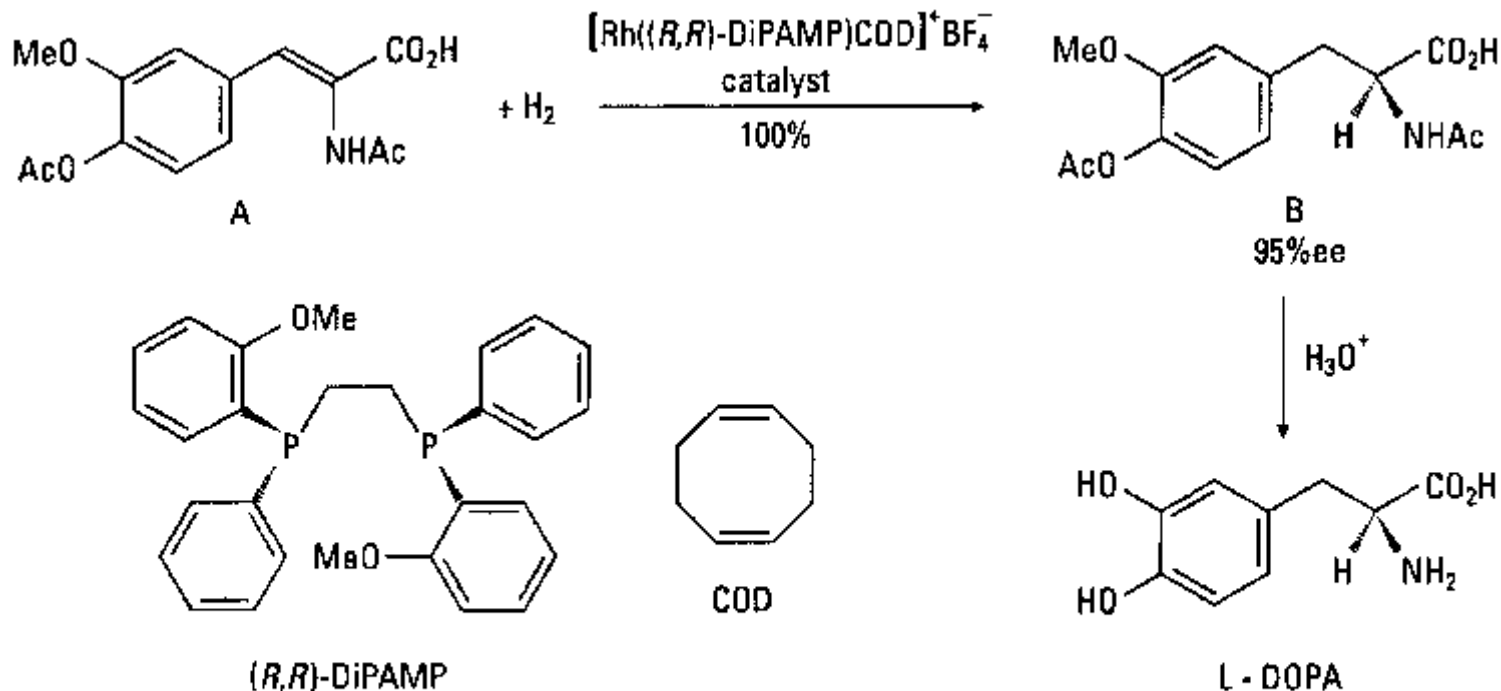
Mas em geral, na natureza apenas um ou outro isômero pode ser encontrado.

Prêmio Nobel de 2001:

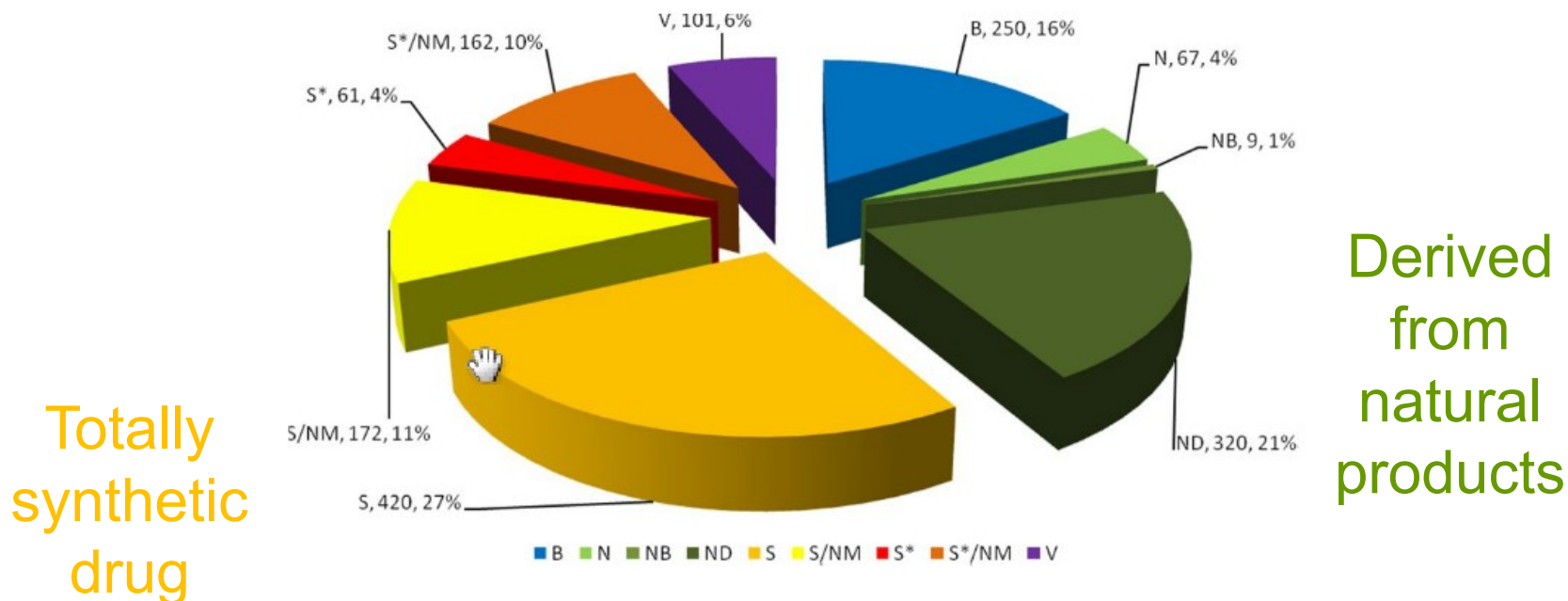
William S. Knowles, Ryoji Noyori e K. Barry Sharpless

“Desenvolvimento de catalisadores quirais que permitiram a síntese de moléculas opticamente ativa.”

Knowles (Monsanto): produção de L-DOPA via hidrogenação:

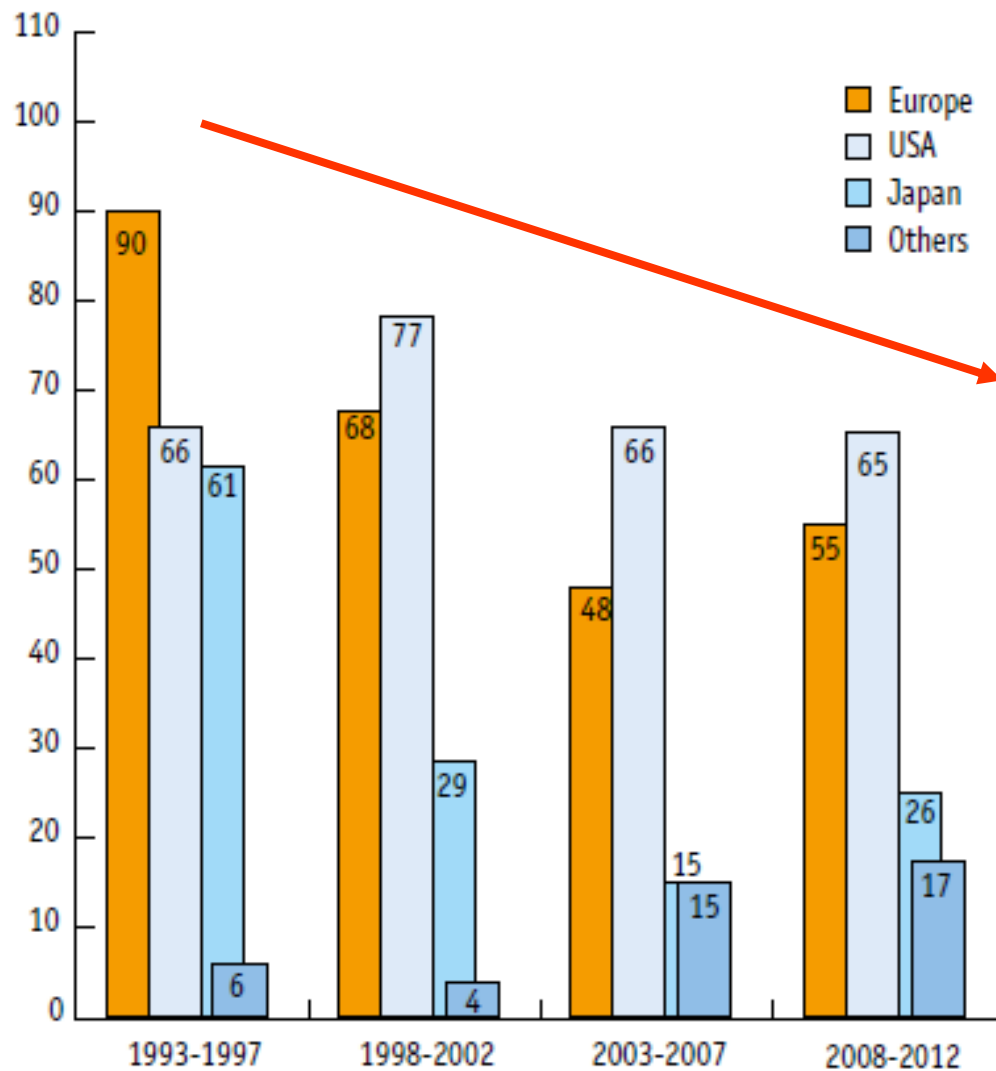


All new approved drugs 1981-2014, by source (N = 1562)



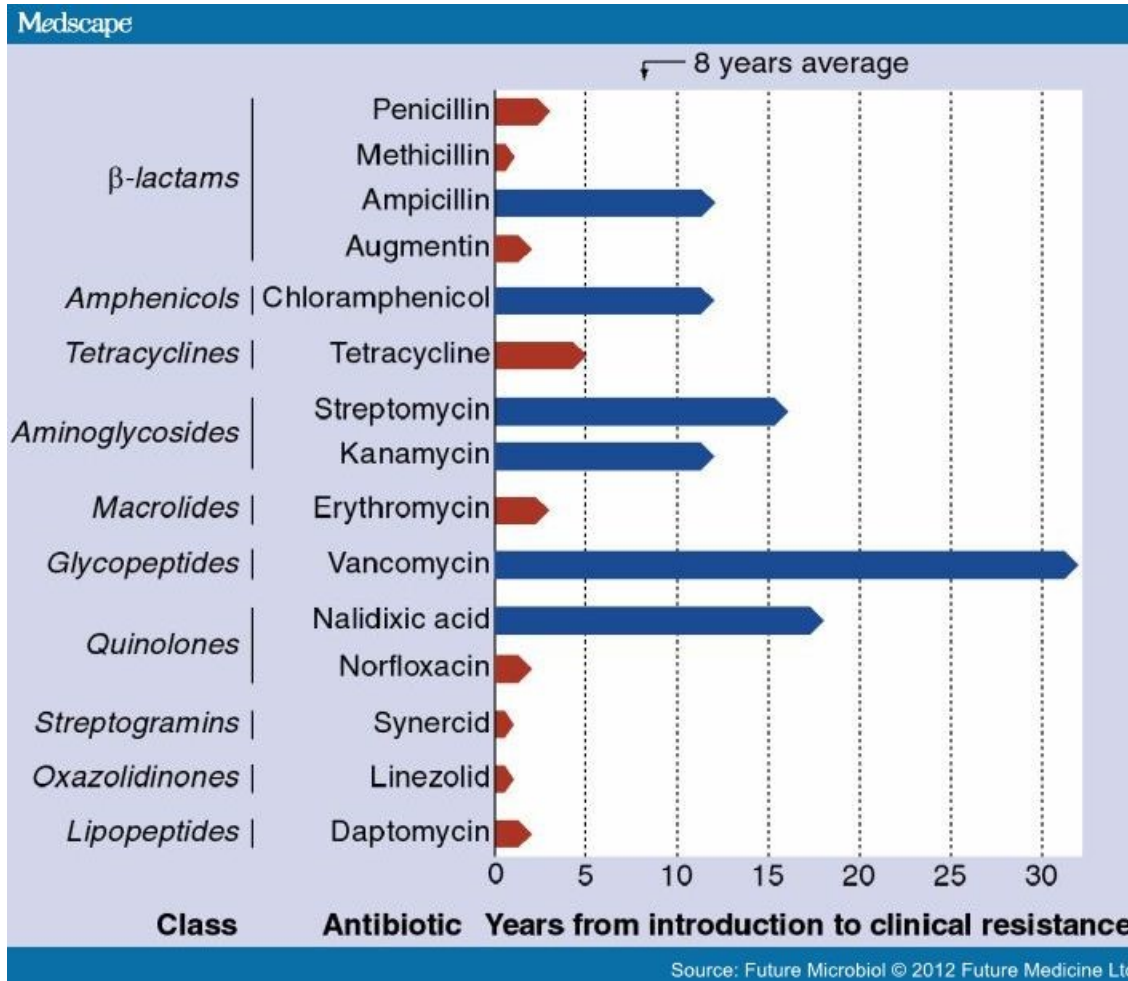
- "B": Biological; usually a large (> 45 residues) peptide or protein either isolated from an organism/cell line or produced by biotechnological means in a surrogate host.
- "N": Natural product.
- "ND": Derived from a natural product and is usually a semisynthetic modification.
- "S": Totally synthetic drug, often found by random screening/modification of an existing agent.
- "S*": Made by total synthesis, but the pharmacophore is/was from a natural product.
- "V": Vaccine.
- "NM": Natural Product Mimic.

NUMBER OF NEW CHEMICAL OR BIOLOGICAL ENTITIES (1993-2012)



Source: SCRIIP - EFPIA calculations (according to nationality of mother company)

Antibiotic resistance evolution showing the rapid development of resistance for several classes of antibiotics



Nosocomial (hospital-linked) infections result in approximately 100,000 deaths and cost more than US\$25 billion per year in the USA alone.

Worldwide, it is estimated that 5–10% of patients entering hospitals develop an infection as a result of their stay.

Uses of natural products

perfumes

insecticides

aromas

drugs

toiletries

etc

Dewick, P. M. (2009) Medicinal Natural Products – A biosynthetic approach. John Wiley & Sons Ltd.

https://en.wikipedia.org/wiki/Natural_product

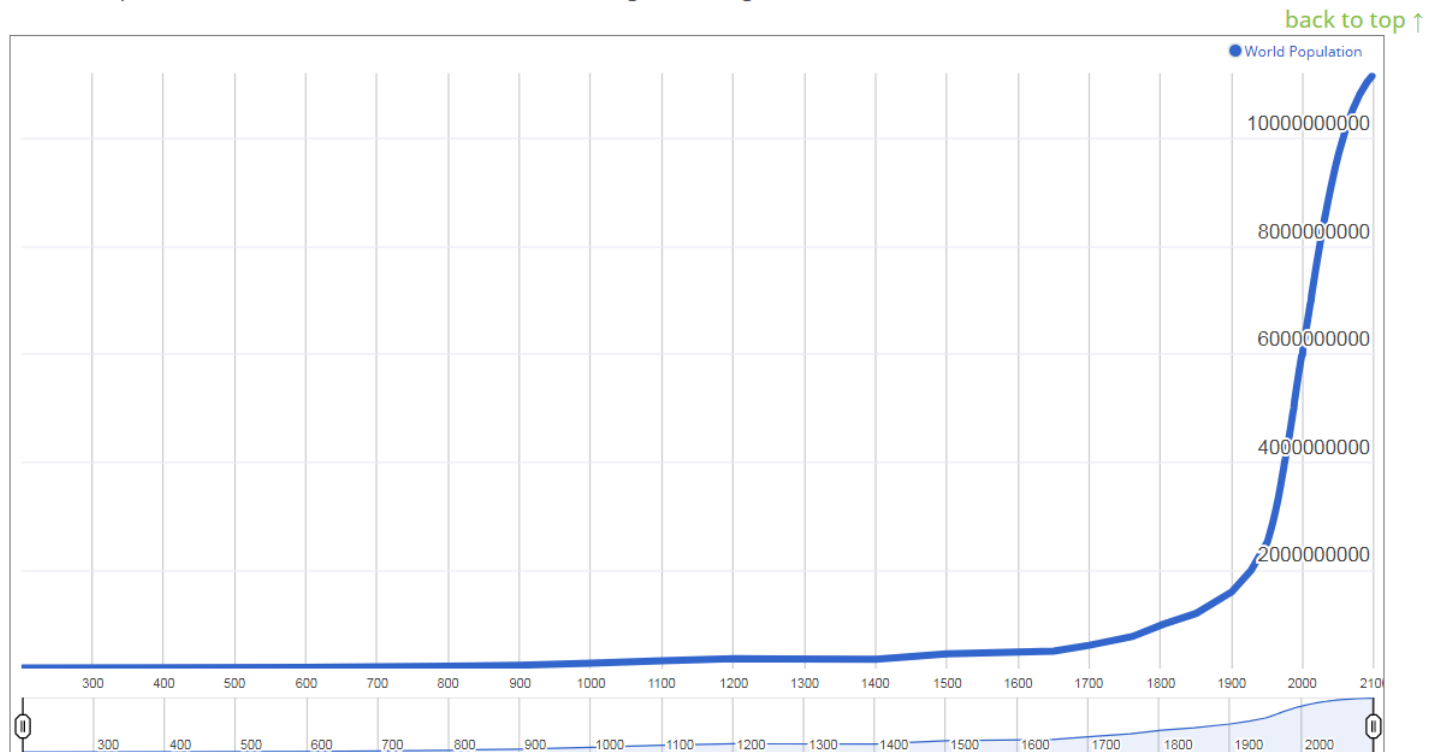
Dias DA et al. (2012) A Historical Overview of Natural Products in Drug Discovery. *Metabolites*. 2(2):303-336. doi:10.3390/metabo2020303.

CHALLENGES TO HEALTH CARE IN A WORLD OUT-OF-BALANCE

- **Exploding population (7.44 bn now, 10.0 bn by 2056)**

World Population: Past, Present, and Future

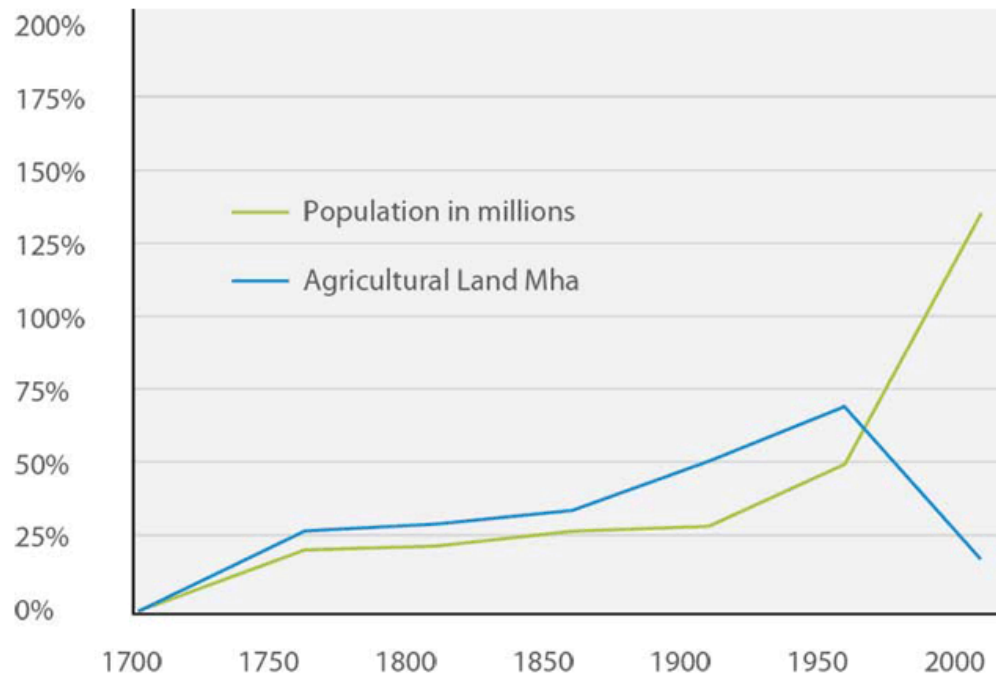
(move and expand the bar at the bottom of the chart to navigate through time)



<http://www.worldometers.info/world-population/#top20>

Problems in feeding 7.5 bn people in the world

Between 1961 and 2000 the world's population increased by 113.9%, whereas the total amount of arable land globally only grew by 10.2%.



Source: Land Commodities Research

© Land Commodities

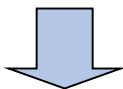
Ser humano moderno e sua dependência por remédios (e pela química orgânica)



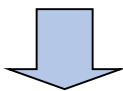
Number of organic compounds
(9.8 – 23 million of compounds)




Structures, names, functional groups,
physical properties,
conformation and stereochemistry



Physico-chemical properties



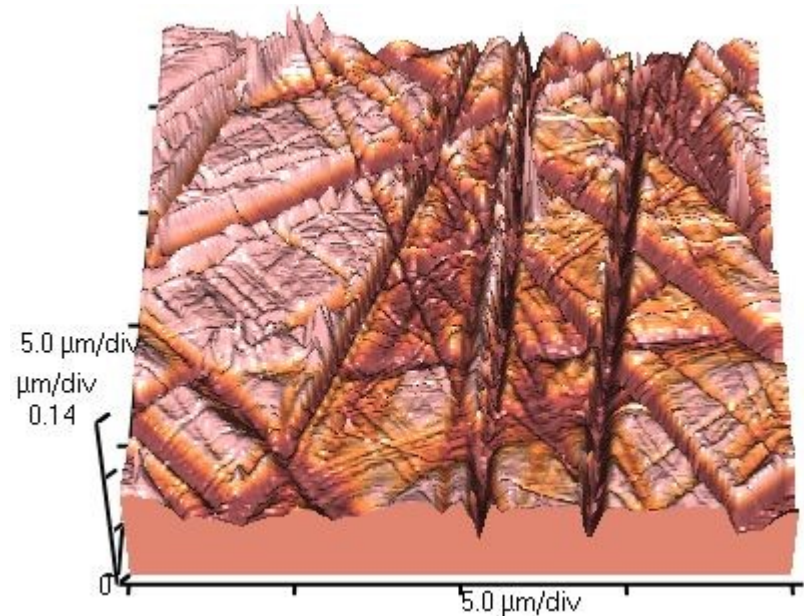
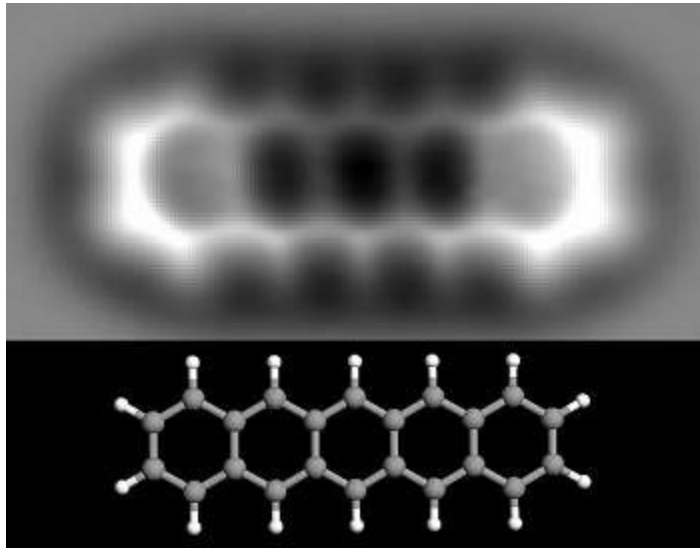
Reactivity and biological properties

A pile of white crystalline powder, likely a salt or sugar, is centered on a black background. The powder is piled up in the middle, with some particles scattered around it. The lighting is bright, highlighting the texture of the crystals.

**Como caracterizar os
compostos orgânicos ?
(esqueleto carbônico,
funções orgânicas e
estereoquímica)**

How to determine a structure of a given compound if I can not see the atoms in molecules?

Atomic force microscopy



Atomic-force microscope topographical scan of a glass surface. The micro and nano-scale features of the glass can be observed, portraying the roughness of the material. The image space is $(x,y,z) = (20 \mu\text{m} \times 20 \mu\text{m} \times 420 \text{nm})$.

Characterization of hydrocarbons

Physical properties: mp, bp, density, solubility

Chemical properties:

Halogenation,

H⁺ catalyzed polymerization for alkenes

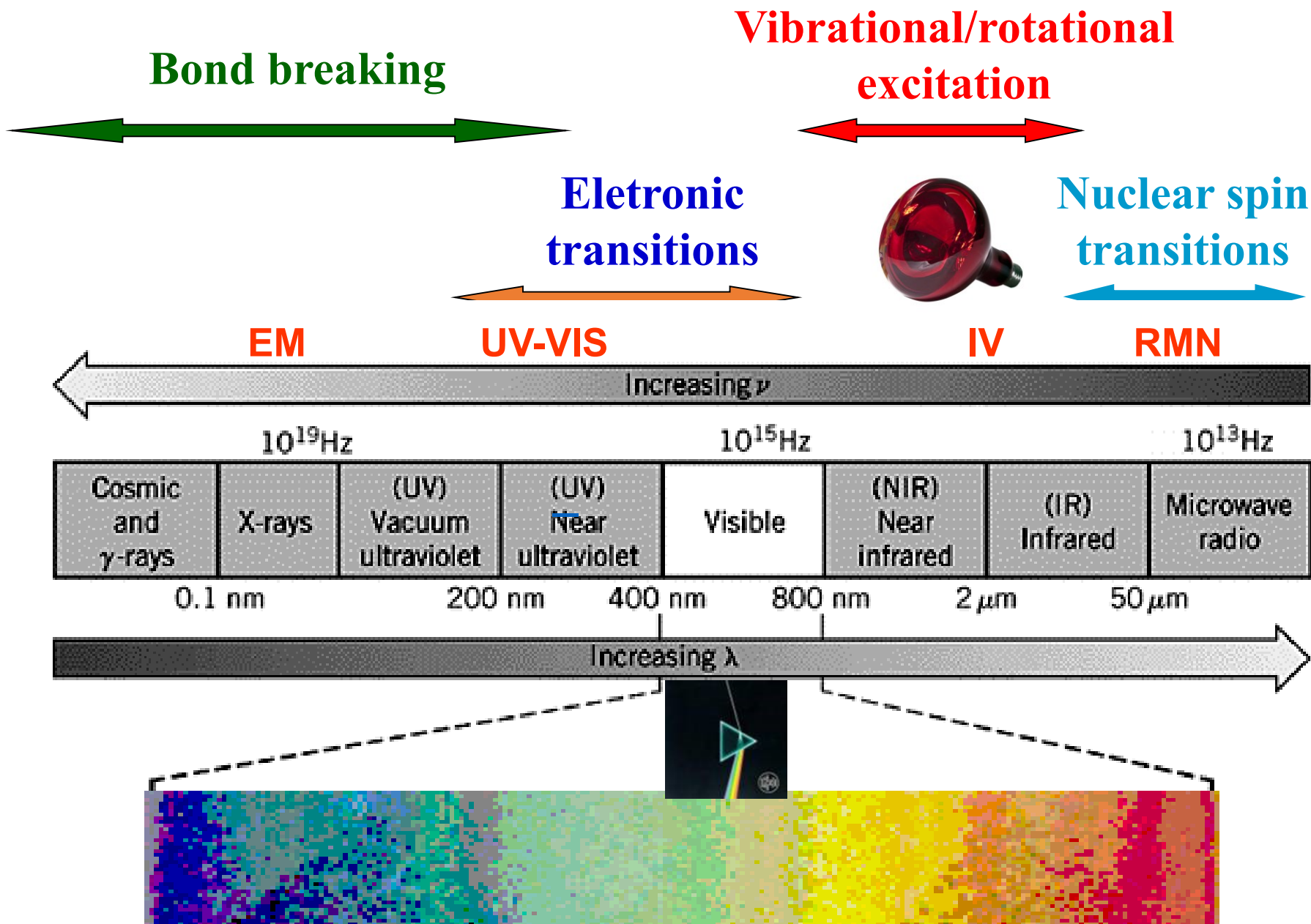
Acidity of terminal alkynes (reaction with strong bases)

Spectroscopy:

mass spectrometry, infrared, ultraviolet
and ¹H NMR

As técnicas espectroscópicas permitem obter informações do universo estelar e também microscópico.

Consistem na perturbação do sistema (íons e moléculas) obtendo-se respostas emitidas (ou transmitidas) através das interações da luz com a matéria em diferentes comprimentos de ondas.



Próxima semana

06	Ligações químicas e grupos funcionais. Nomenclatura e representação de moléculas orgânicas. Hidrocarbonetos (alcanos, alcenos e acetilenos) 1ª Lista de exercícios.
09	Nomenclatura e representação de hidrocarbonetos. Estabilidade de espécies reativas derivadas de hidrocarbonetos saturados e insaturados.