



INSTITUTO FEDERAL
Rondônia
Campus Ji-Paraná

QUÍMICA ORGÂNICA III

Estrutura, Reatividade, Transformações e
Reconhecimento Espectral de Moléculas Orgânicas



Prof. Dr. Rafael Vieira

Docente de Química Orgânica
IFRO Ji-Paraná

REAÇÕES DE AMINAS



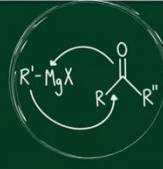
ESTRUTURA



REATIVIDADE

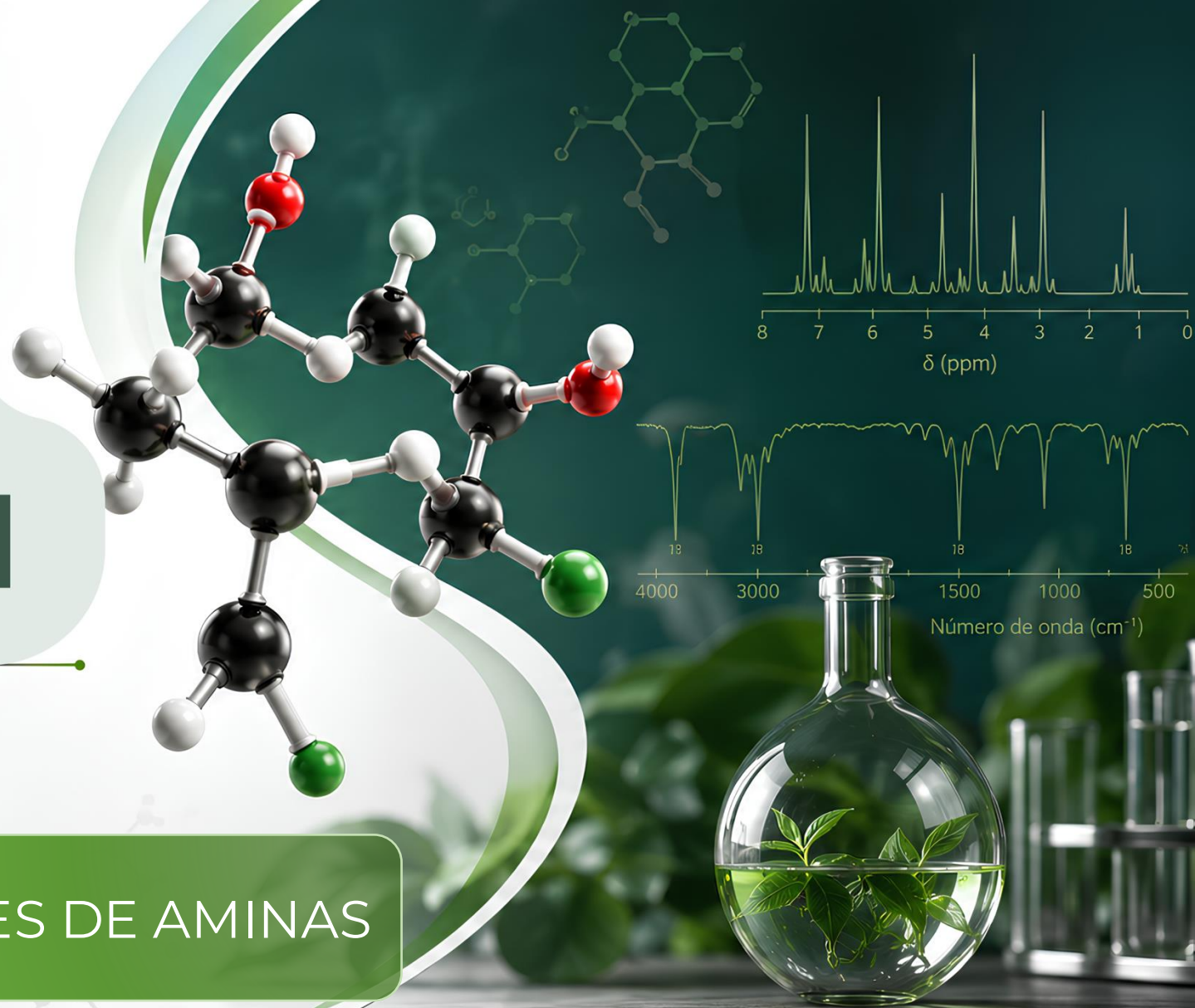


ESPECTROSCOPIA



MECANISMOS

“ Da natureza à estrutura:
evidências que **revelam moléculas**.



AMINAS

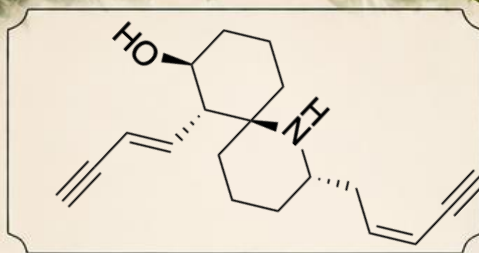
Moléculas que Defendem e Caçam

A QUÍMICA DAS TOXINAS NATURAIS

Na natureza, pequenas moléculas
podem ter grandes efeitos.

Rãs colombianas
venenosas

*Pequenas, belas
e mortíferas.*



Histrionicotoxina

Uma amina neurotóxica que causa
paralisa e, por fim, a morte pela asfixia,
ao impedir a ação da acetilcolina.

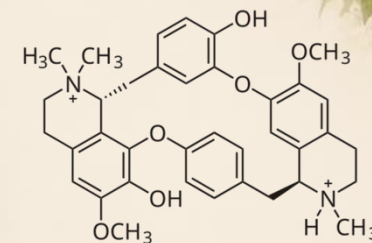
Acetilcolina

Receptor
bloqueado

SINALIZAÇÃO MUSCULAR INIBIDA
→ PARALISIA

Curare

*Conhecimento ancestral
da floresta amazônica,
utilizado para a caça
e para a autoproteção.*

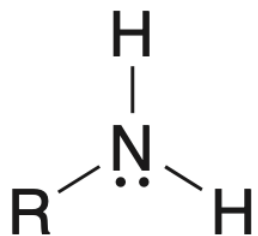


d-Tubocurarina

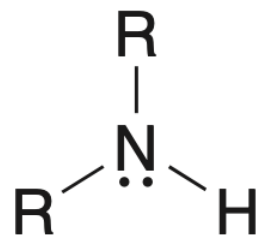
Outra neurotoxina paralisante que
também bloqueia a função da acetilcolina,
impedindo a sinalização elétrica que
ativa os músculos respiratórios.

*"Da floresta à molécula,
a natureza ensina que a química também é sobrevivência."*

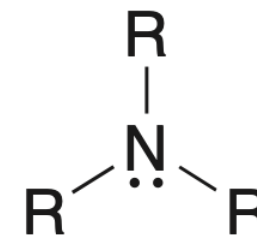
AMINAS



AMINAS PRIMÁRIAS

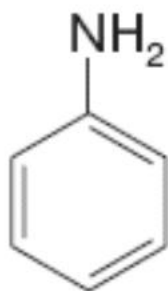


AMINAS SECUNDÁRIAS



AMINAS TERCÍARIAS

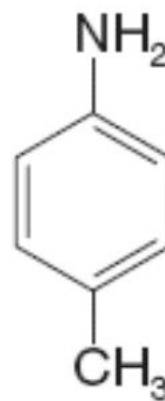
ARILAMINAS



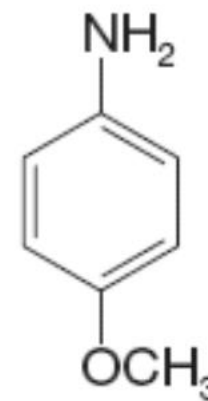
Anilina
(benzenamina)



N-Metilanilina
(*N*-metil-
benzenamina)

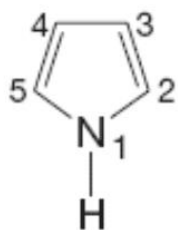


p-Toluidina
(4-metil-
benzenamina)

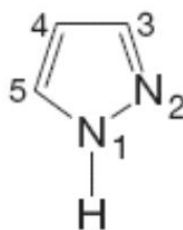


p-Anisidina
(4-metoxi-
benzenamina)

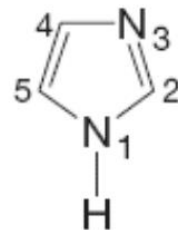
AMINAS HETEROCÍCLICAS



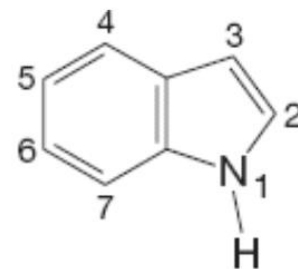
Pirrol
(1-azaciclopenta-2,4-dieno)



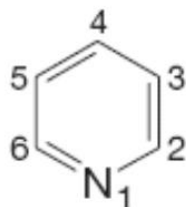
Pyrazol
(1,2-diazaciclopenta-2,4-dieno)



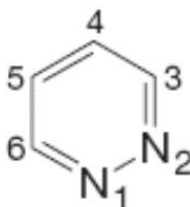
Imidazol
(1,3-diazaciclopenta-2,4-dieno)



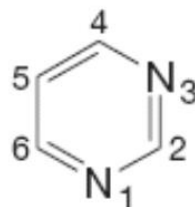
Indol
(1-azaindeno)



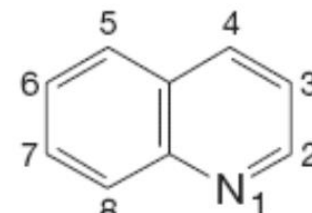
Piridina
(azabenzeno)



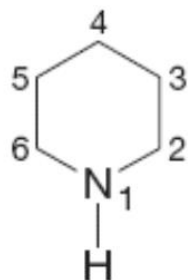
Piridazina
(1,2-diazabenzeno)



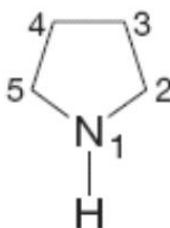
Pirimidina
(1,3-diazabenzeno)



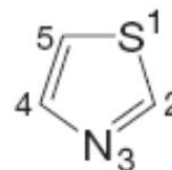
Quinolina
(1-azanaftaleno)



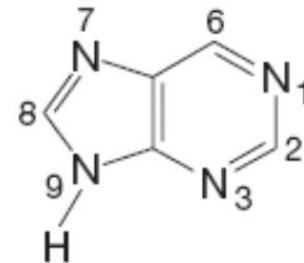
Piperidina
(azaciclo-hexano)



Pirrolidina
(azaciclopentano)

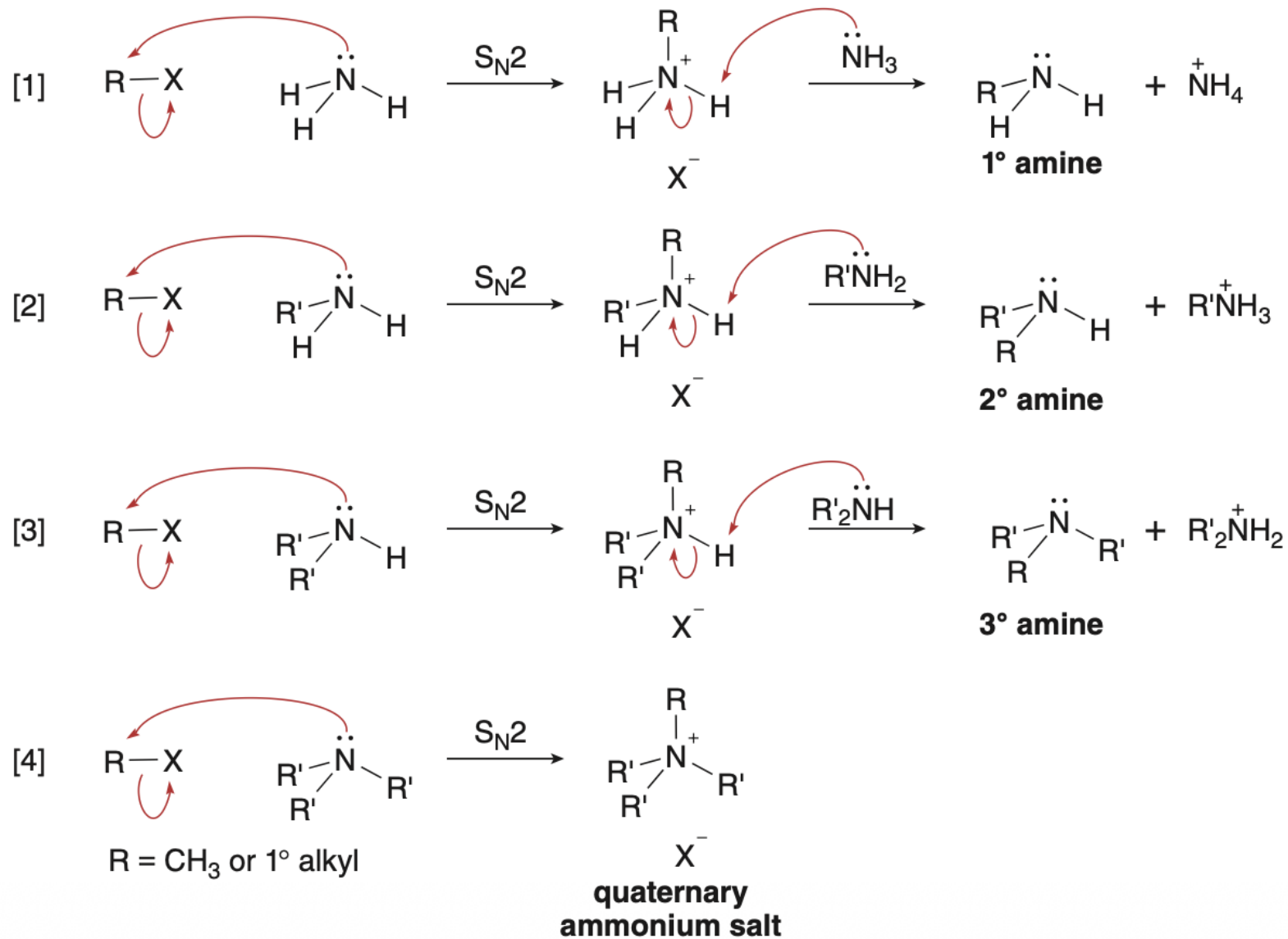


Tiazol
(1-tia-3-azaciclopenta-2,4-dieno)

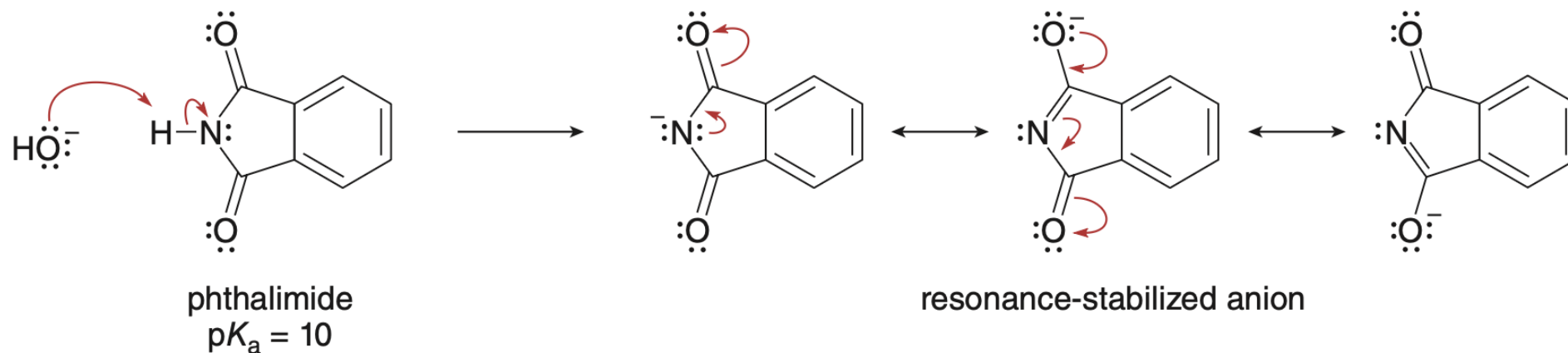


Purina

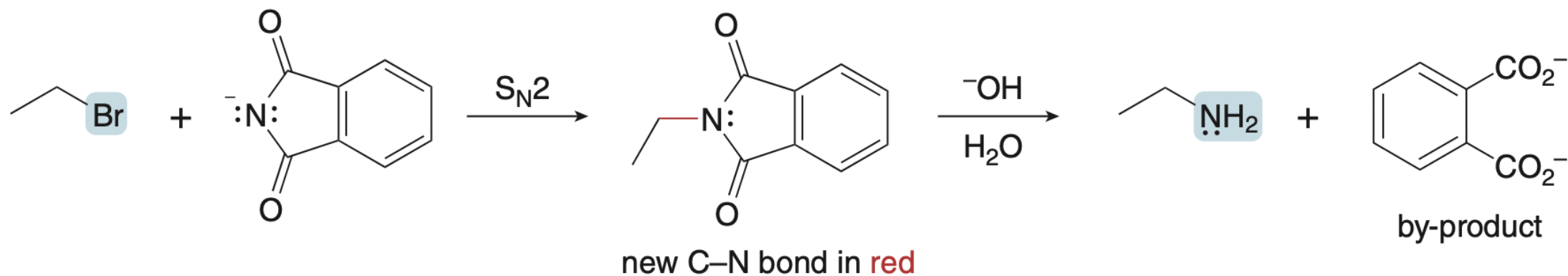
PREPARAÇÃO DE AMINAS



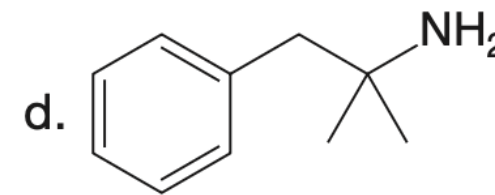
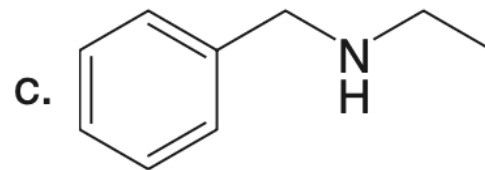
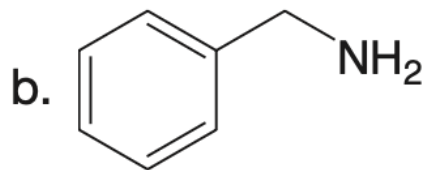
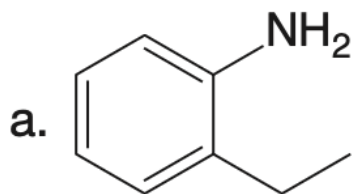
A SÍNTESE DE GABRIEL



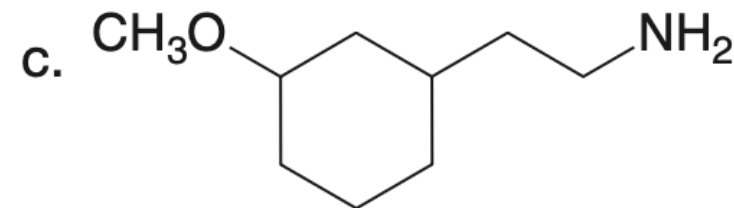
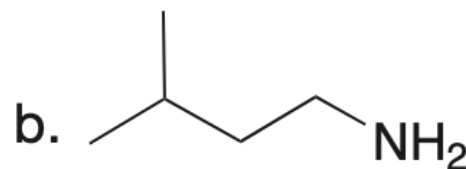
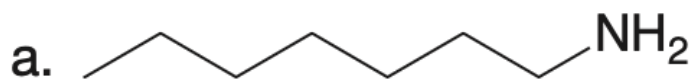
A SÍNTESE DE GABRIEL CONVERTE UM HALETTO PRIMÁRIO EM AMINA TAMBÉM PRIMÁRIA



QUAIS DESSAS ESTRUTURAS PODE SER PRODUZIDA PELA SÍNTESE DE GABRIEL?

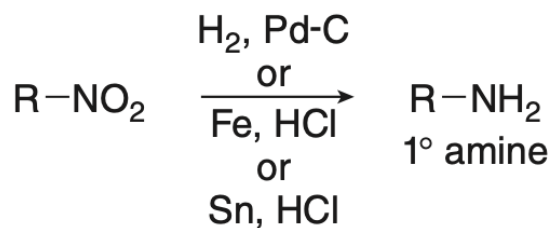


E AS MOLÉCULAS ABAIXO PODEM SER FEITAS A PARTIR DE QUAIS HALETOS?

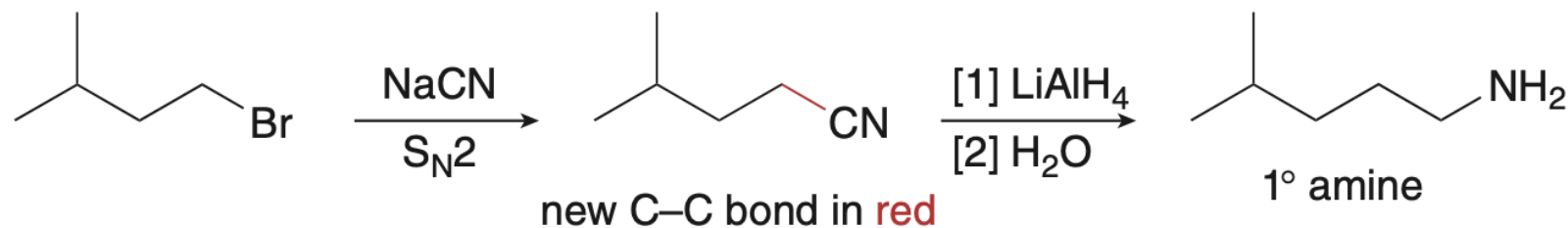
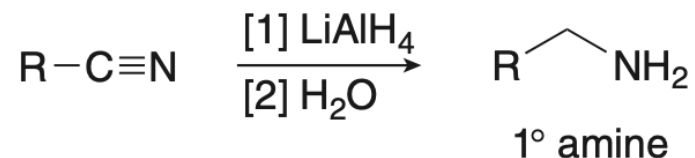


REDUÇÃO DE GRUPOS QUE APRESENTAM NITROGÊNIO

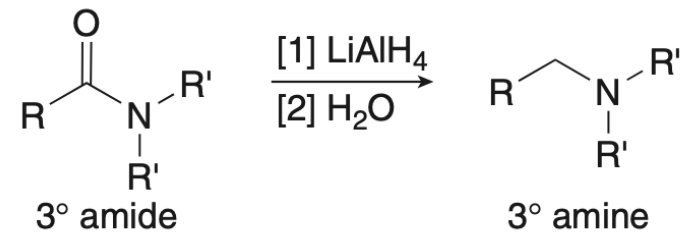
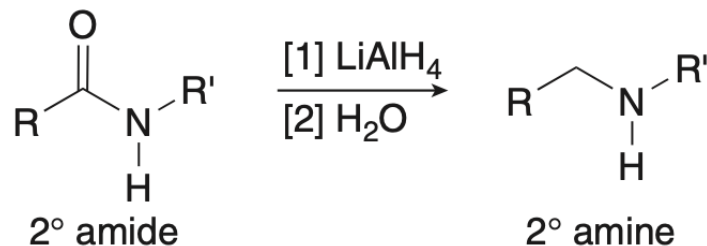
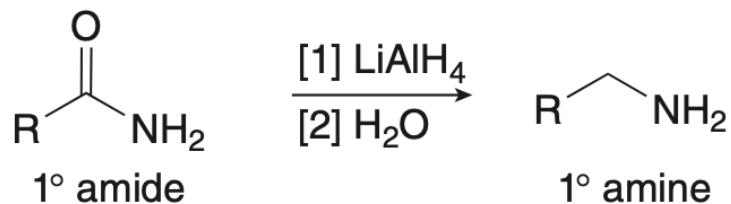
NITRO



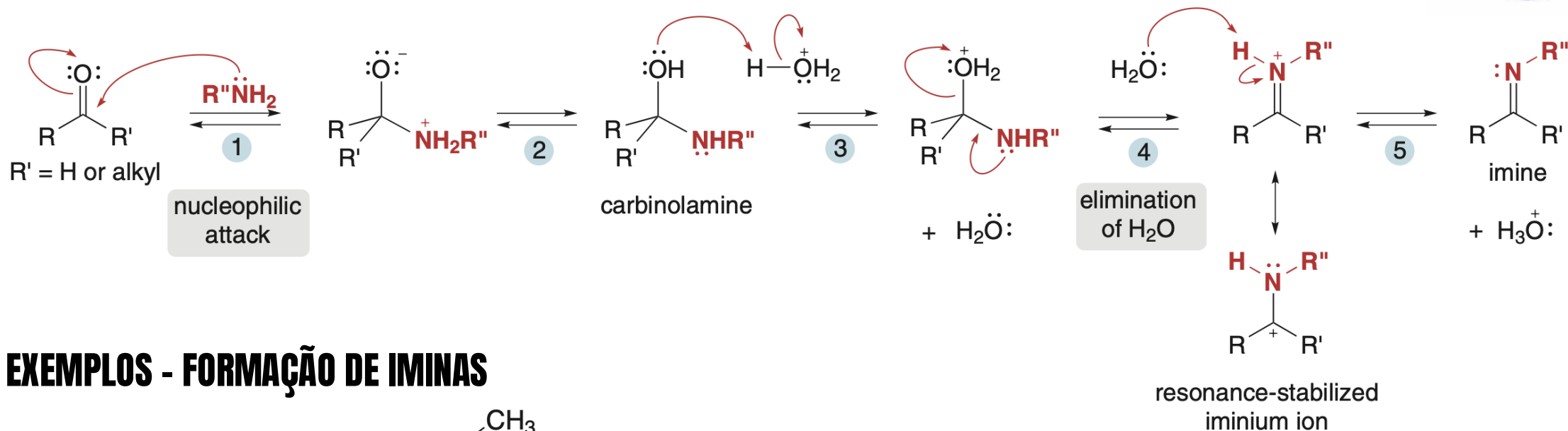
NITRILAS



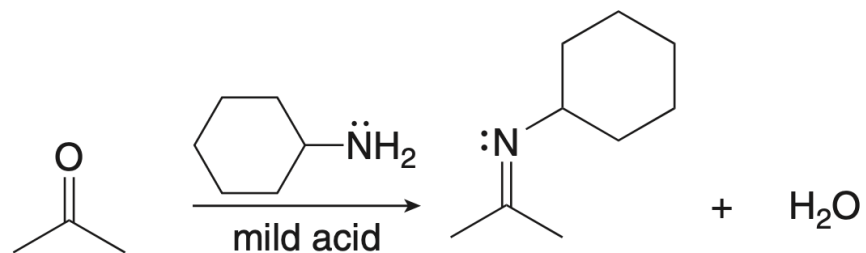
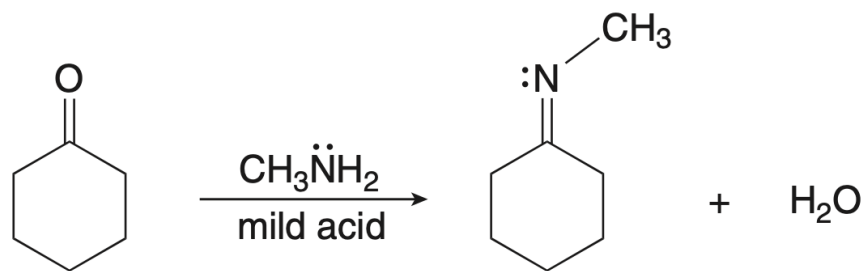
AMIDAS



ADIÇÃO DE AMINAS 1ª

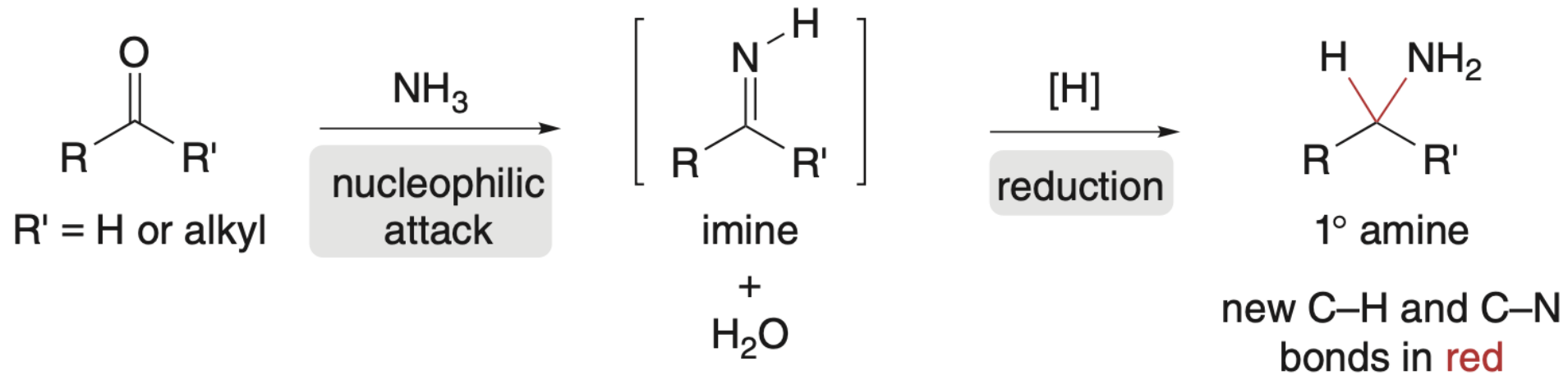


EXEMPLOS - FORMAÇÃO DE IMINAS

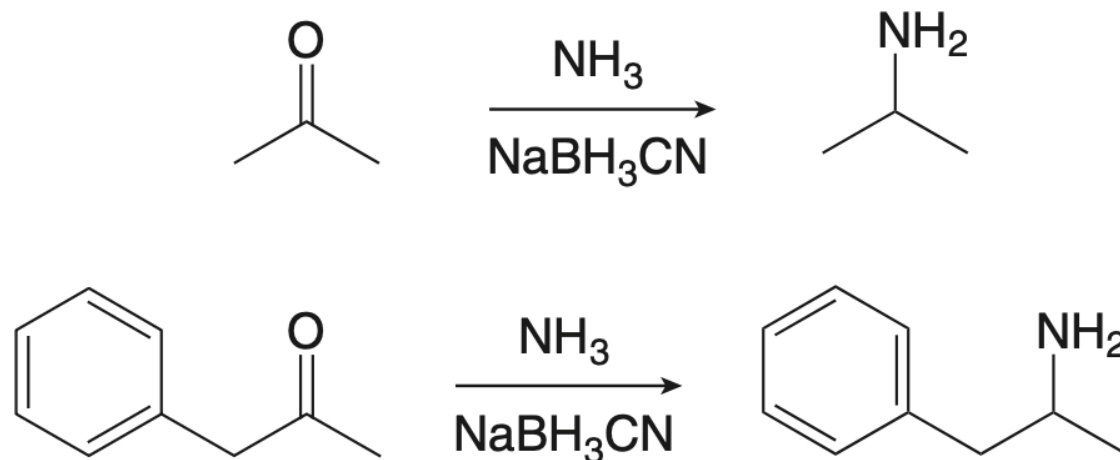


IMINA É UMA FUNÇÃO ORGÂNICA
QUE VOCÊS AINDA NÃO CONHECIAM!

AMINAÇÃO REDUTIVA DE ALDEÍDOS E CETONAS

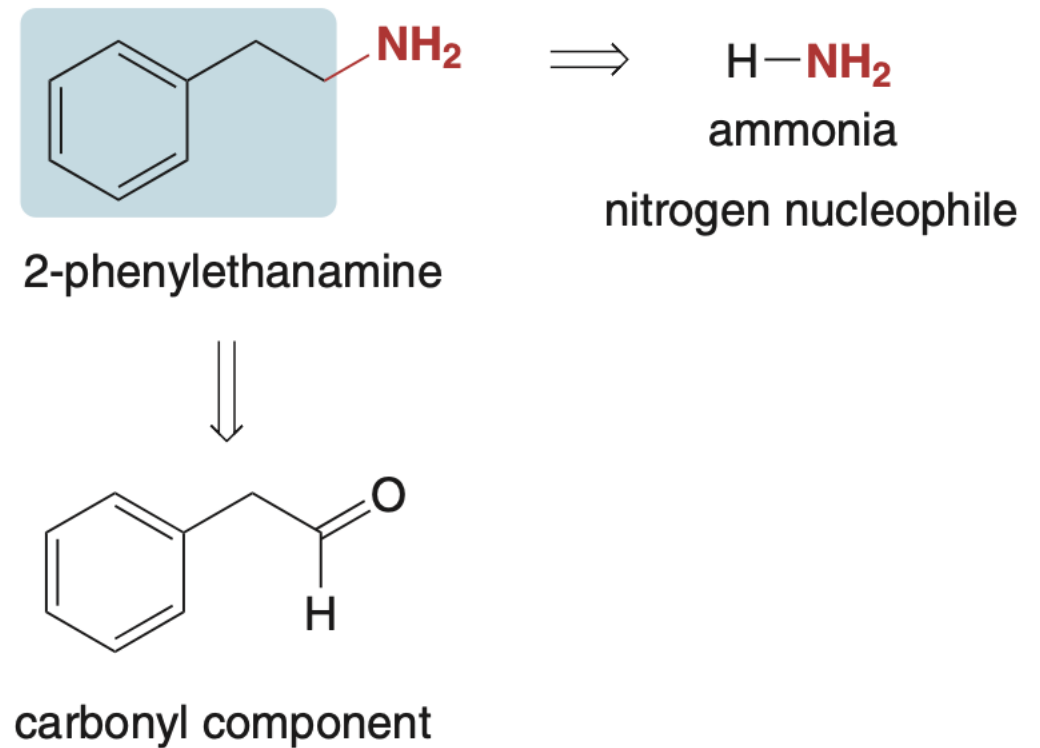
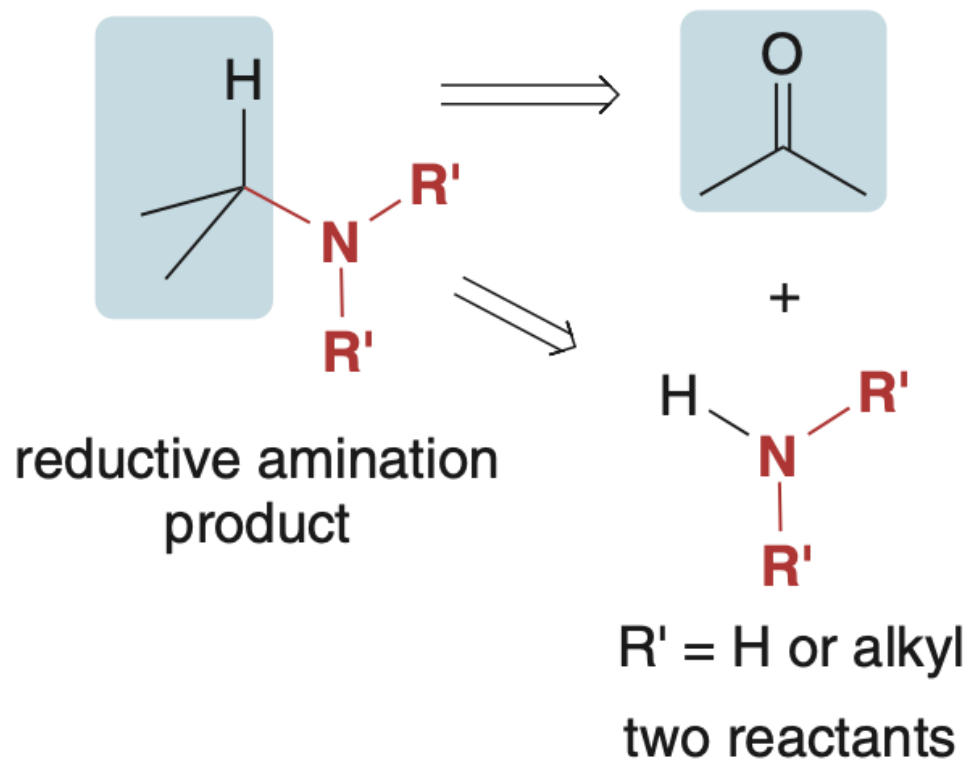


EXEMPLOS



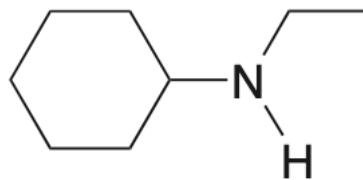
AMINAÇÃO REDUTIVA DE ALDEÍDOS E CETONAS

Análises retrossintéticas

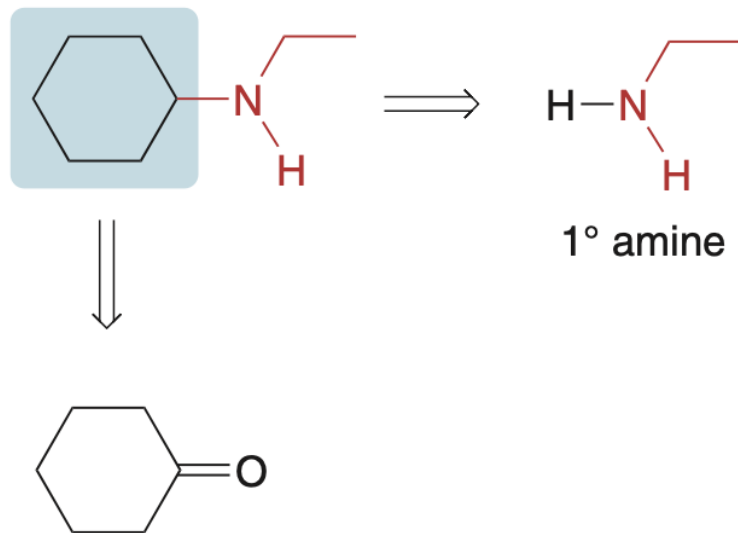


AMINAÇÃO REDUTIVA DE ALDEÍDOS E CETONAS

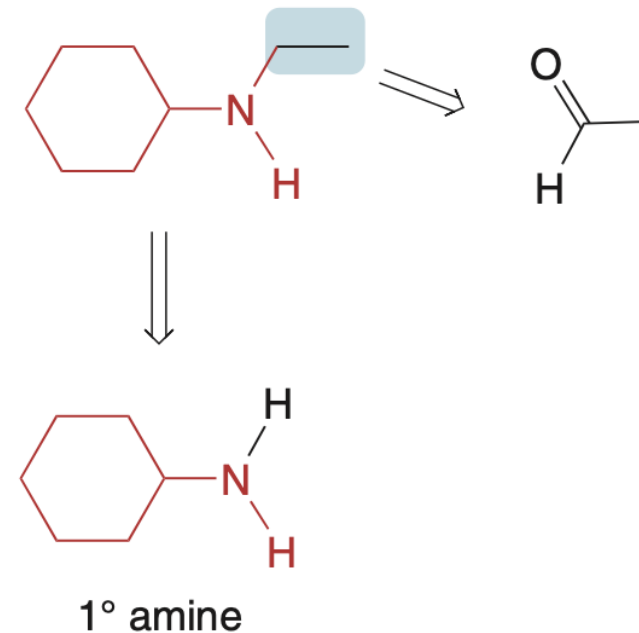
Análises retrossintéticas



Possibility [1] Use $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{NH}_2$ and cyclohexanone.

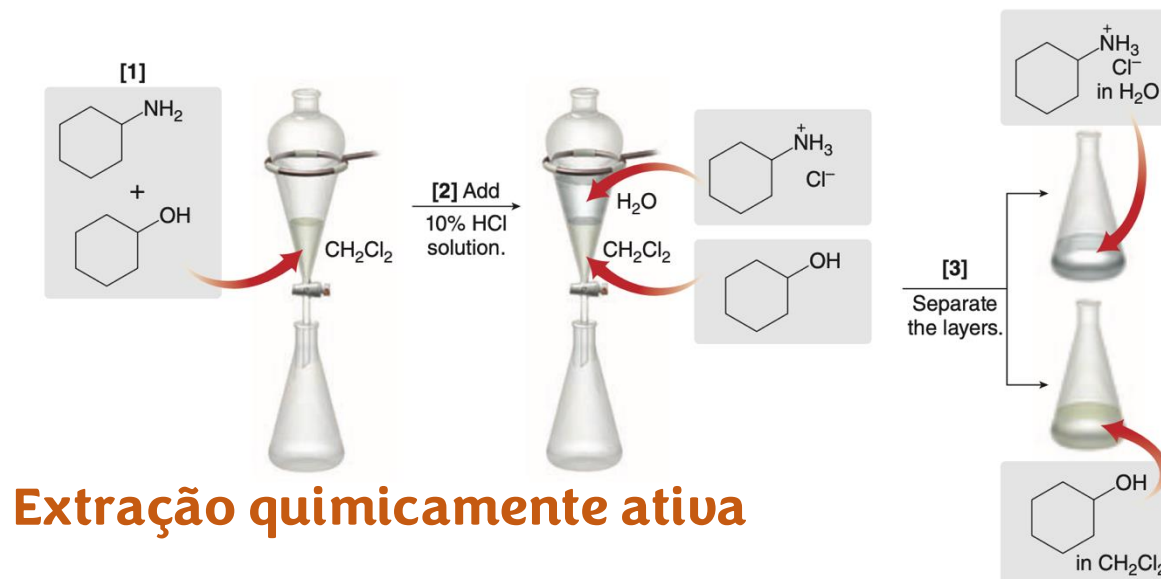
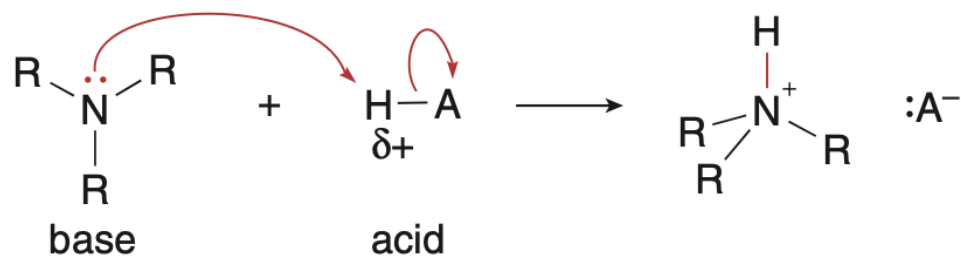


Possibility [2] Use cyclohexanamine and an aldehyde.

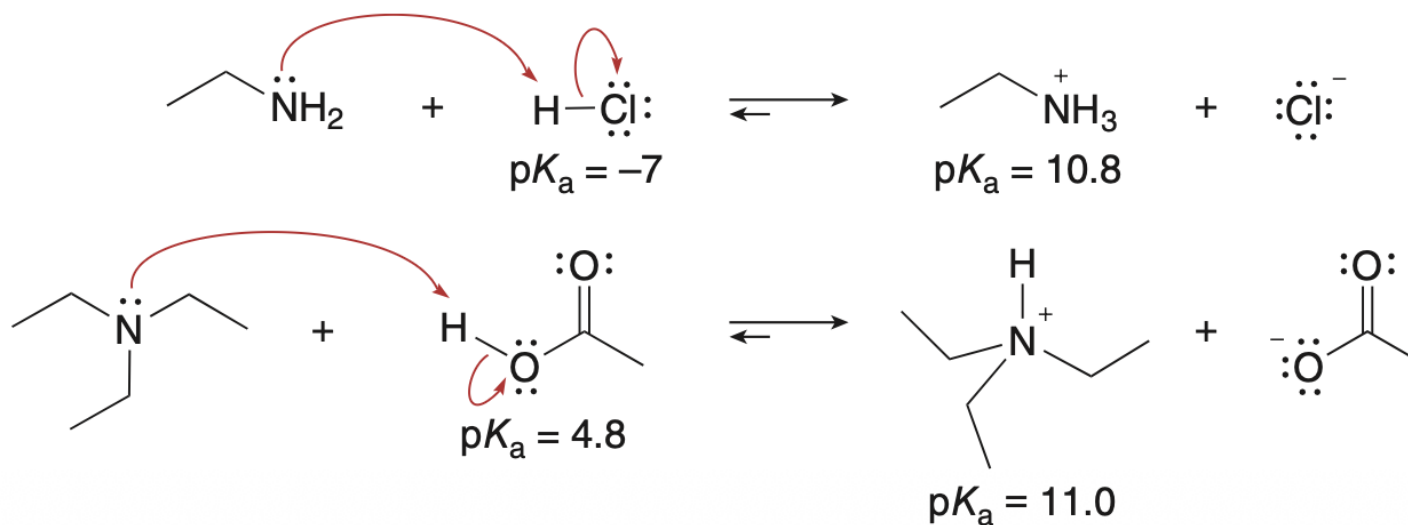


REAÇÕES DAS AMINAS

Reação Geral

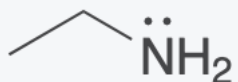


Exemplos

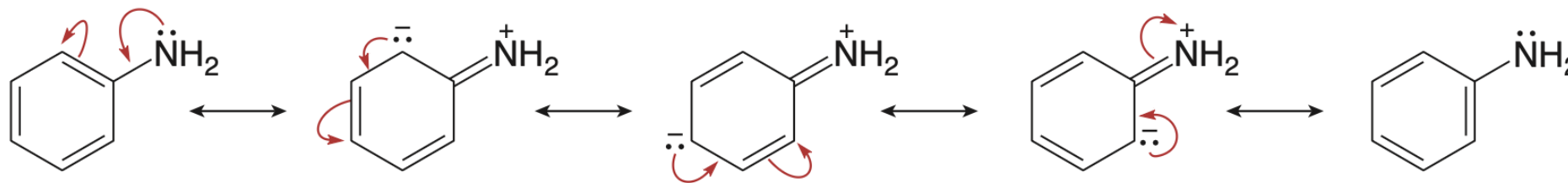


Equilibrium favors the products.

Comparando alquilaminas com arilaminas

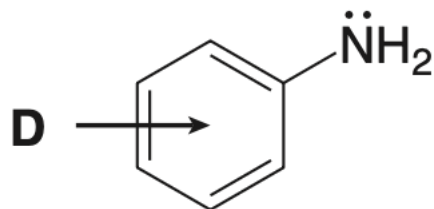


Par de elétrons é localizado



Par de elétrons é **deslocalizados**

D = grupos doadores de elétrons

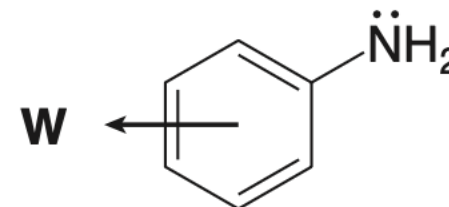


D DEIXA AS AMINAS
MAIS BÁSICAS

D

-NH₂
-OH
-OR
-NHCOR
-R

W = grupos retiradores de elétrons.



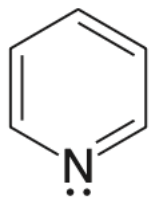
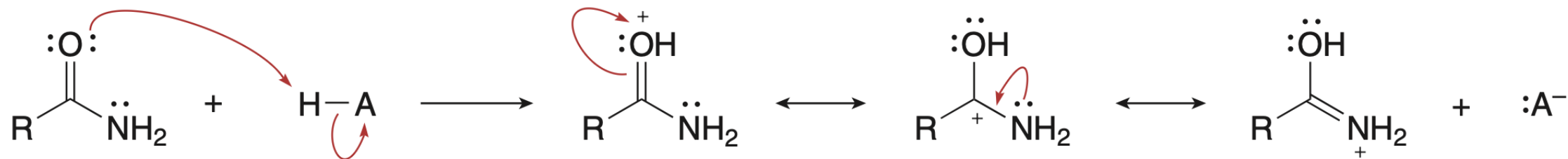
W DEIXA AS AMINAS
MENOS BÁSICAS

W

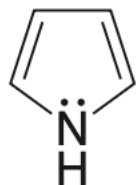
-X -CN
-CHO -SO₃H
-COR -NO₂
-COOR -NR₃⁺
-COOH

AMIDAS com AMINAS E COMPOSTOS HETEROCÍCLICOS

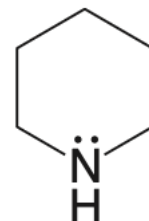
REATIVIDADE DAS AMINAS



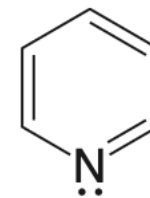
pyridine



pyrrole



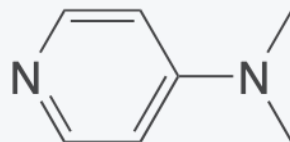
piperidine



pyridine

EFEITO DA AROMATICIDADE

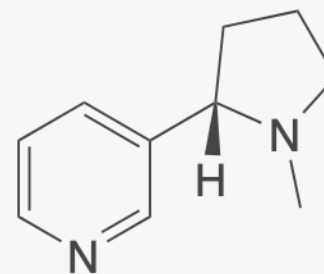
a.



DMAP

4-(*N,N*-dimethylamino)pyridine

b.



nicotine

EFEITO DA HIBRIDIZAÇÃO

Cloroquina

DA ESTRUTURA À AÇÃO
CONTRA A MALÁRIA

Desde 1945, a cloroquina é utilizada no tratamento da malária, uma doença infecciosa causada pelo protozoário *Plasmodium*, transmitido pela fêmea do mosquito *Anopheles*.

MOLÉCULAS
DOENÇAS TROPICAIS
SAÚDE PÚBLICA
QUÍMICA MEDICINAL
IMPACTO GLOBAL

CIÊNCIA
QUE COMBATE
DOENÇAS E
TRANSFORMA
REALIDADES.

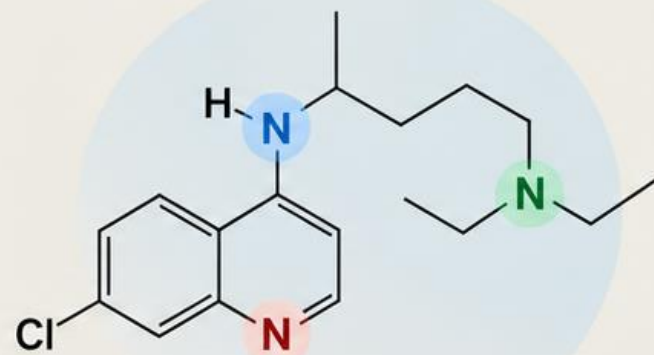


Anopheles spp.

a.

ESTRUTURA

Molécula da cloroquina

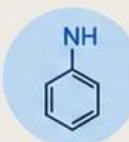


cloroquina



N do anel aromático

Está em um sistema aromático (tipo piridina). O par de elétrons está deslocalizado no anel, o que diminui a basicidade.



N ligado ao anel

Está ligado diretamente ao anel aromático (como em uma anilina). O par de elétrons também se deslocaliza no anel, reduzindo a basicidade.



N da cadeia lateral

Possui o par de elétrons localizado. Está hibridizado em sp^3 (amina alifática). Apresenta maior densidade eletrônica e é o sítio mais básico da molécula.

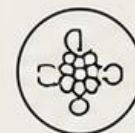
b.

POR QUE É IMPORTANTE?

Ação contra o *Plasmodium*



A cloroquina se acumula no interior dos eritrócitos, em compartimentos ácidos (vacuolo alimentar) do parasita.



Ela interfere na conversão da heme tóxica em hemozoina, levando ao acúmulo de heme e à morte do parasita.



É eficaz contra formas sanguíneas do *Plasmodium*, especialmente *P. vivax*, *P. ovale* e *P. malariae*.

Química a serviço da vida.



Malária ainda afeta mais de 200 milhões de pessoas por ano no mundo.

Lupinus

DA NATUREZA ÀS MOLÉCULAS

O gênero *Lupinus* é abundante nos Andes peruanos e em regiões do Alasca, e produz uma grande variedade de alcaloides com importantes atividades biológicas.

ANDES
ALASCA
BIODIVERSIDADE
ALCALOIDES
SAÚDE

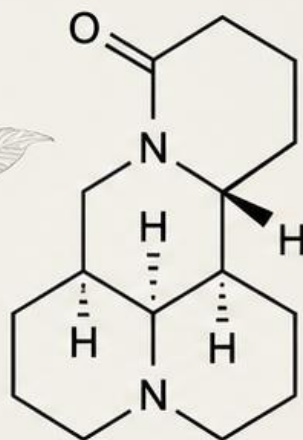
PLANTAS
QUE CONECTAM
TERRITÓRIOS,
PESSOAS E
DESCOBERTAS.



a.

MATRINA

alcaloide de lupino



Alcaloide quinolizidínico presente em espécies de *Lupinus*.



Apresenta diversas atividades biológicas, incluindo efeitos anti-inflamatórios, antivirais e antitumorais.

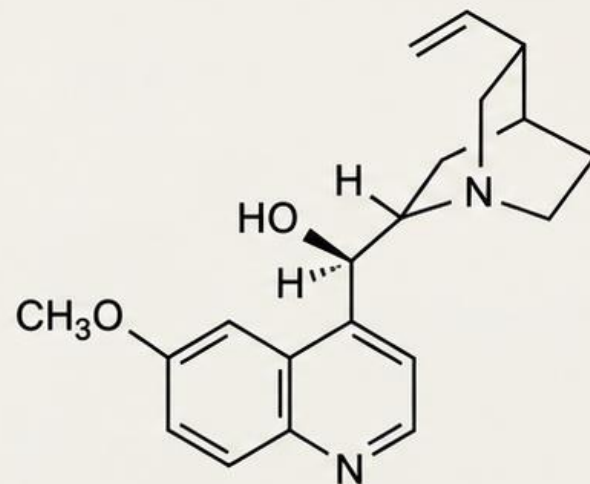


Estrutura com dois nitrogênios em anéis saturados, conferindo propriedades básicas e alta reatividade.

b.

QUININA

fármaco antimalárico



Alcaloide natural isolado da casca da *Cinchona* spp.



Utilizado no tratamento da malária, atuando contra o protozoário do gênero *Plasmodium*.



Exemplo clássico de como moléculas naturais podem se tornar fármacos essenciais para a saúde global.

HISTÓRIA
NATUREZA
QUÍMICA
MEDICINA

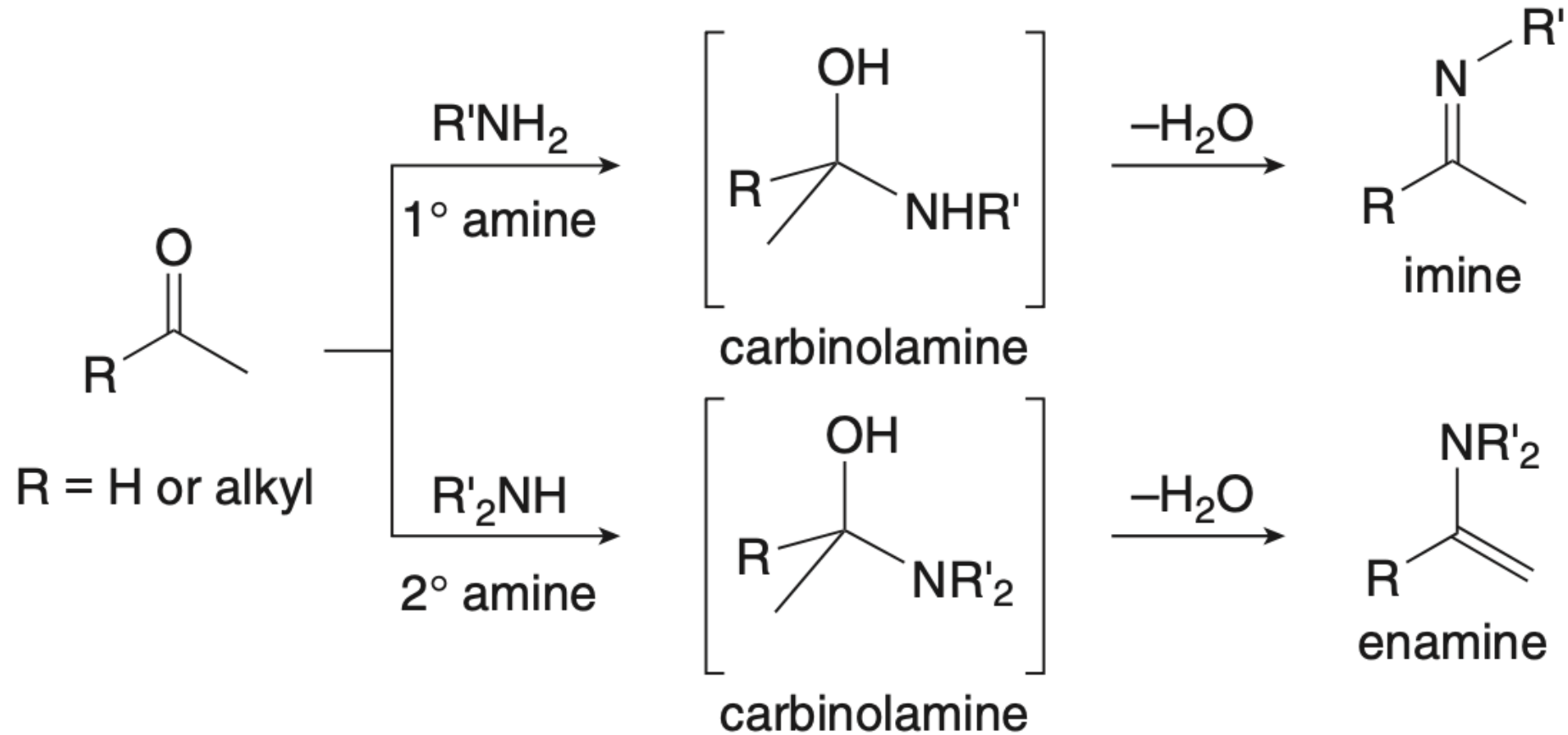
Extraída da casca de espécies do gênero *Cinchona*, a quinina marcou a história da medicina no combate à malária.



AMINAS COMO NUCLEÓFILOS

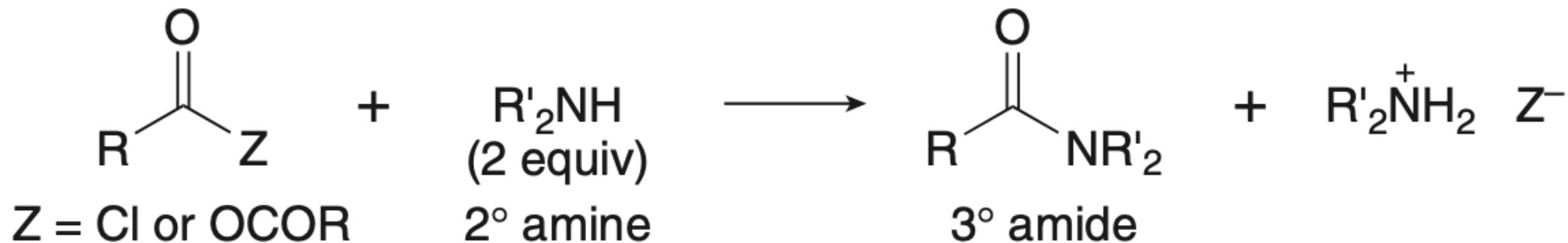
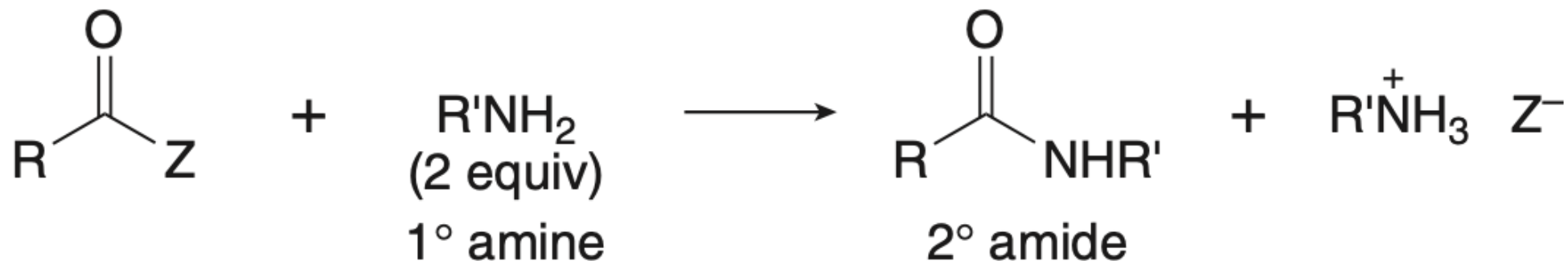
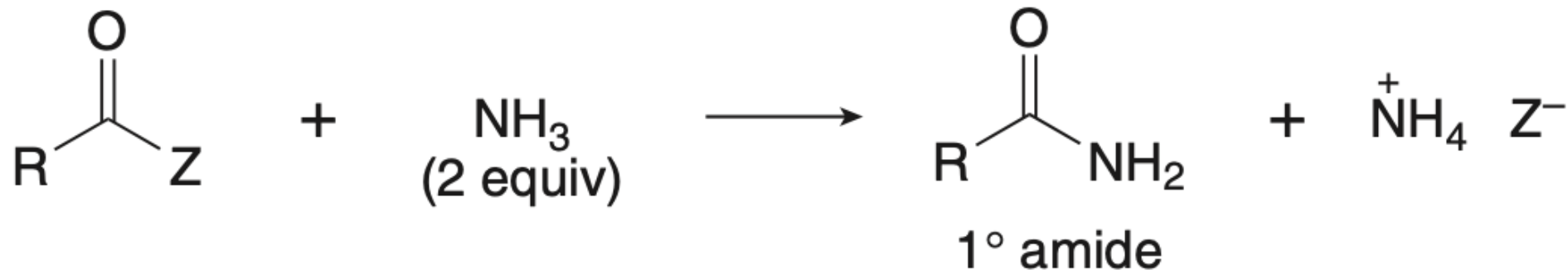
EM ALDEÍDOS E CETONAS

REAÇÕES



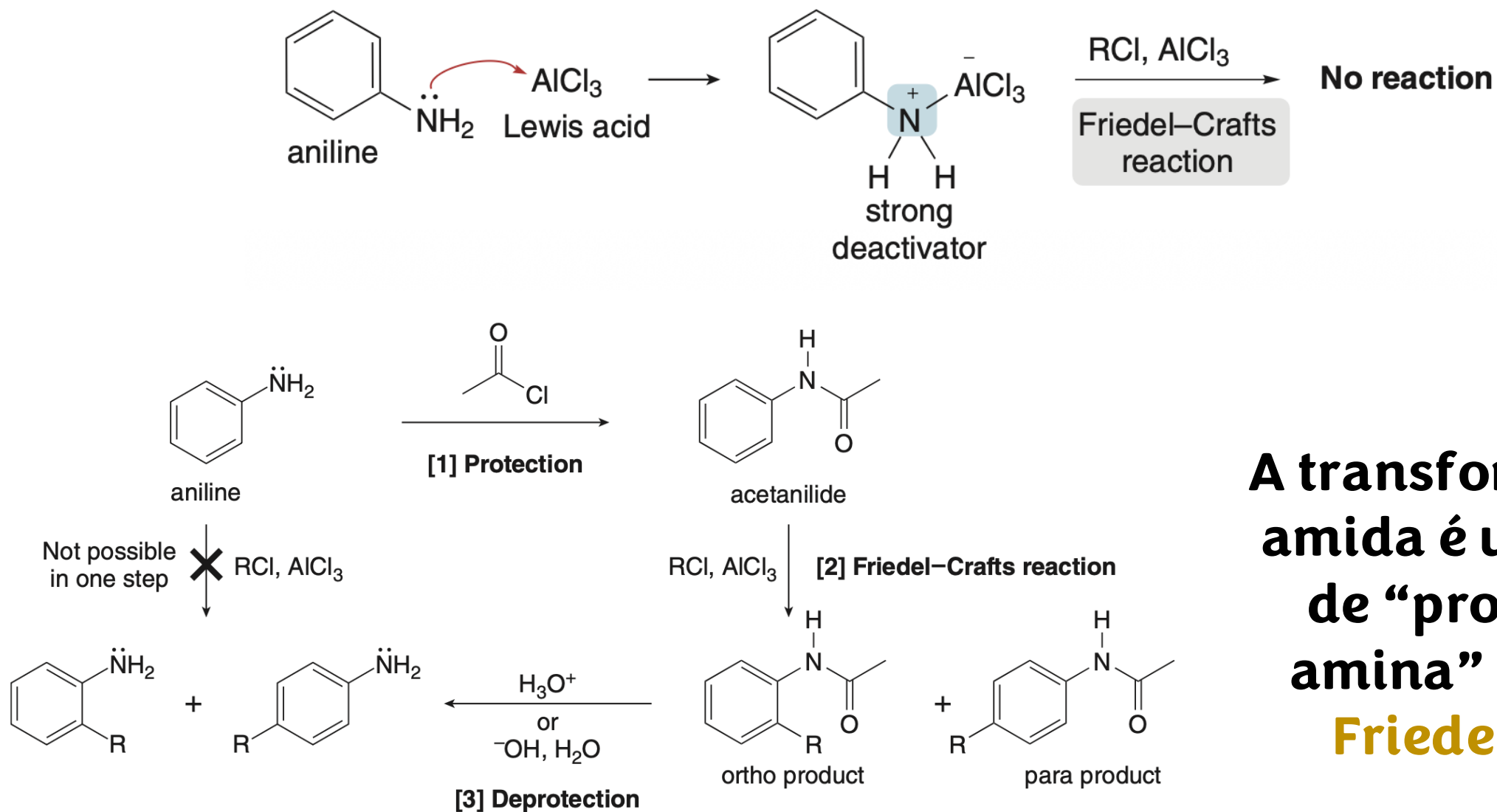
AMINAS COMO NUCLEÓFIOS

EM HALETOS E DERIVADOS DE ÁCIDO CARBOXÍLICO



AMINAS COMO NUCLEÓFILOS

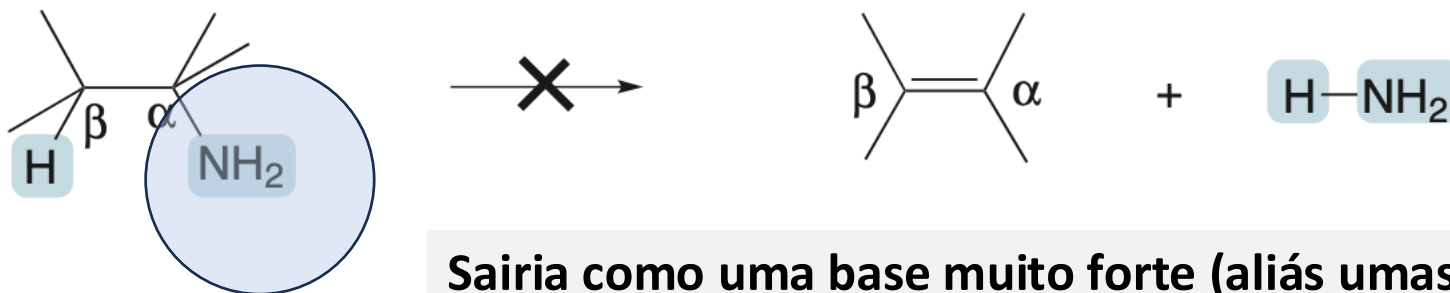
EM HALETOS E DERIVADOS DE ÁCIDO CARBOXÍLICO - APLICAÇÃO



A transformação em amida é uma forma de “proteção da amina” e permite Friedel-Crafts

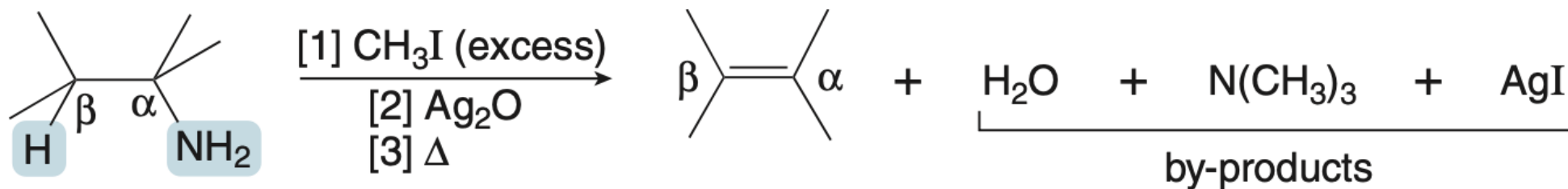
AMINAS COMO NUCLEÓFILOS

Desafio da eliminação em aminas



Sairia como uma base muito forte (aliás umas das mais fortes em orgânica)

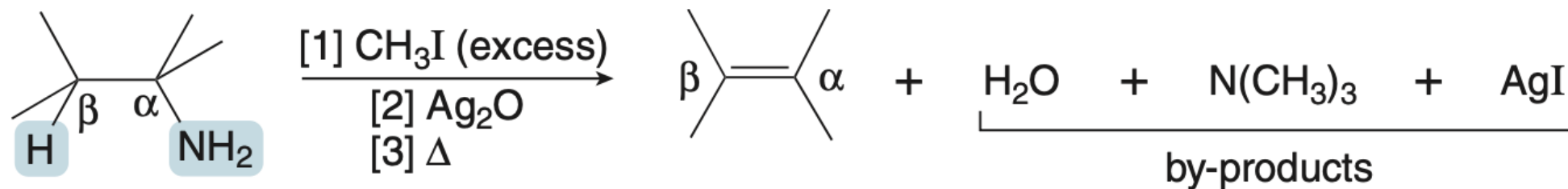
ELIMINAÇÃO DE HOFFMANN



Hofmann
elimination

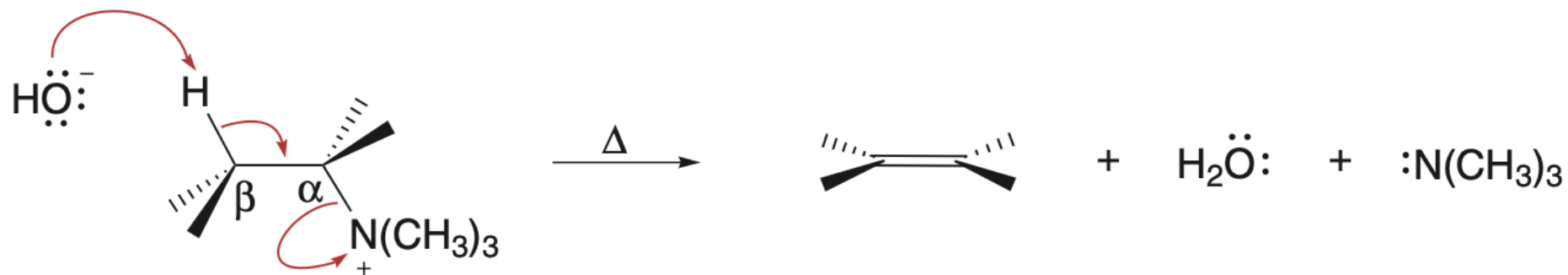
AMINAS COMO NUCLEÓFILOS

ELIMINAÇÃO DE HOFFMANN



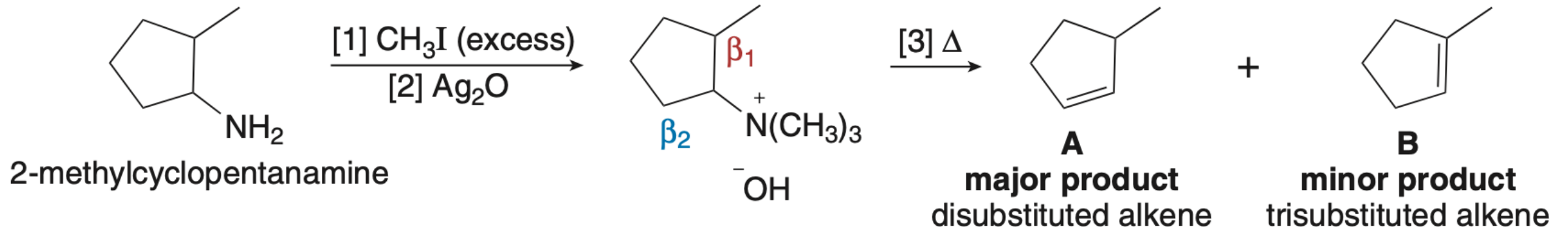
Hofmann
elimination

MECANISMO DA REAÇÃO DE ELIMINAÇÃO DE HOFFMANN

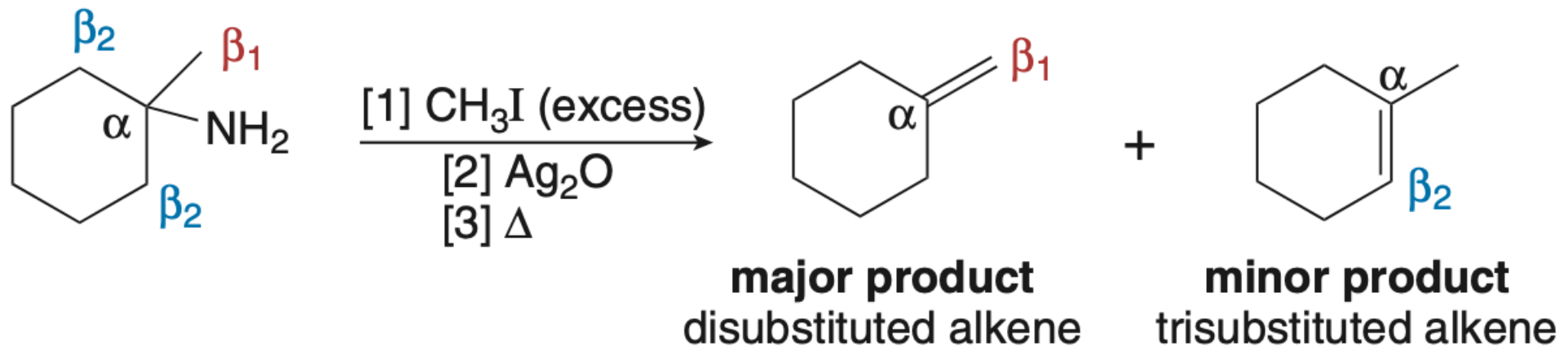


AMINAS COMO NUCLEÓFILOS

ELIMINAÇÃO DE HOFFMANN – REGIOSSELETIVIDADE



EXEMPLO



PROFESSOR & PESQUISADOR

Dr. Rafael Vieira, Química Orgânica, Computacional & Machine Learning

Professor e pesquisador especializado em quimiometria, aprendizado de máquina e análise de produtos naturais, atuando na formação de novos pesquisadores na interseção entre química, estatística e ciência da computação.

[Ver Projetos](#)[Entrar em Contato](#)[ORCID ↗](#)