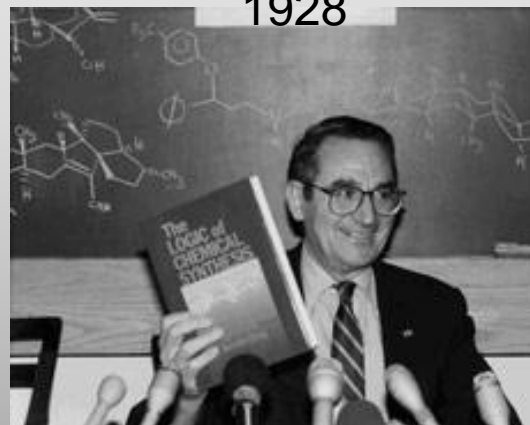


DEFINIÇÃO DE TERMOS USADOS EM SÍNTESE

1928*



E. J. Corey

Premio Nobel em 1990

"Por desenvolver teorias e metodologias de síntese orgânica"

O QUE É SÍNTESE ORGÂNICA ?

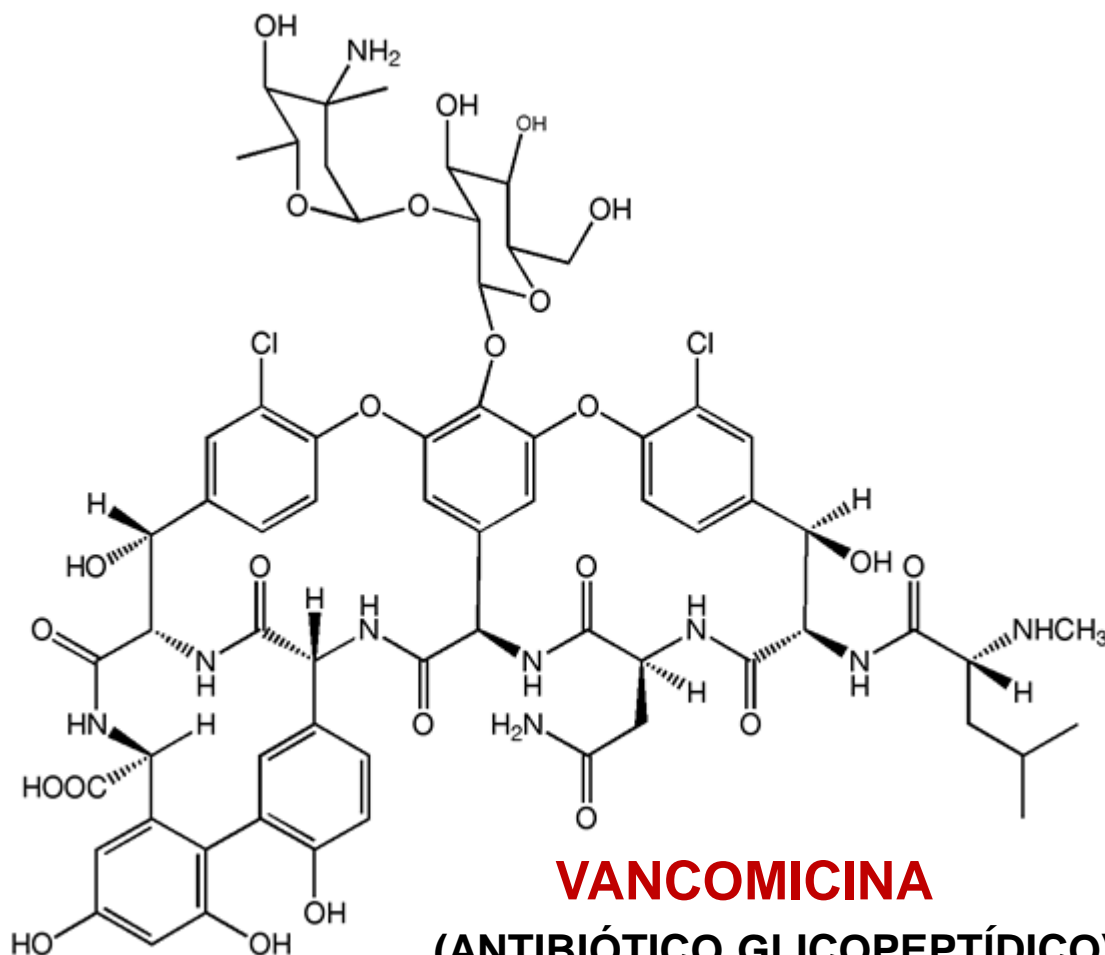
É UMA SUB-ÁREA DA QUÍMICA ORGÂNICA QUE VISA A SÍNTESE DE MOLÉCULAS ORGÂNICA A PARTIR DE SUB-UNIDADES MENOS COMPLEXAS QUE POSSUEM **GRUPOS FUNCIONAIS**.

GRUPOS FUNCIONAIS

SÃO PORÇÕES DE ESTRUTURAS ORGÂNICAS QUE PODEM SER MANIPULADAS VISANDO O AUMENTO DA COMPLEXIDADE DESSAS ESTRUTURAS. PODEM SER UTILIZADOS PARA INTRODUIZIR NOVOS GRUPOS OU COMPONENTES PARA UMA DADA MOLÉCULA.

ESTES GRUPOS SÃO DITOS REATIVOS EM COMPARAÇÃO COM LIGAÇÕES COMUNS C-C OU C-H: ELES CONFEREM DIFERENTES TIPOS DE REATIVIDADE PARA DETERMINADAS FACES DE MOLECULAS ORGÂNICAS.

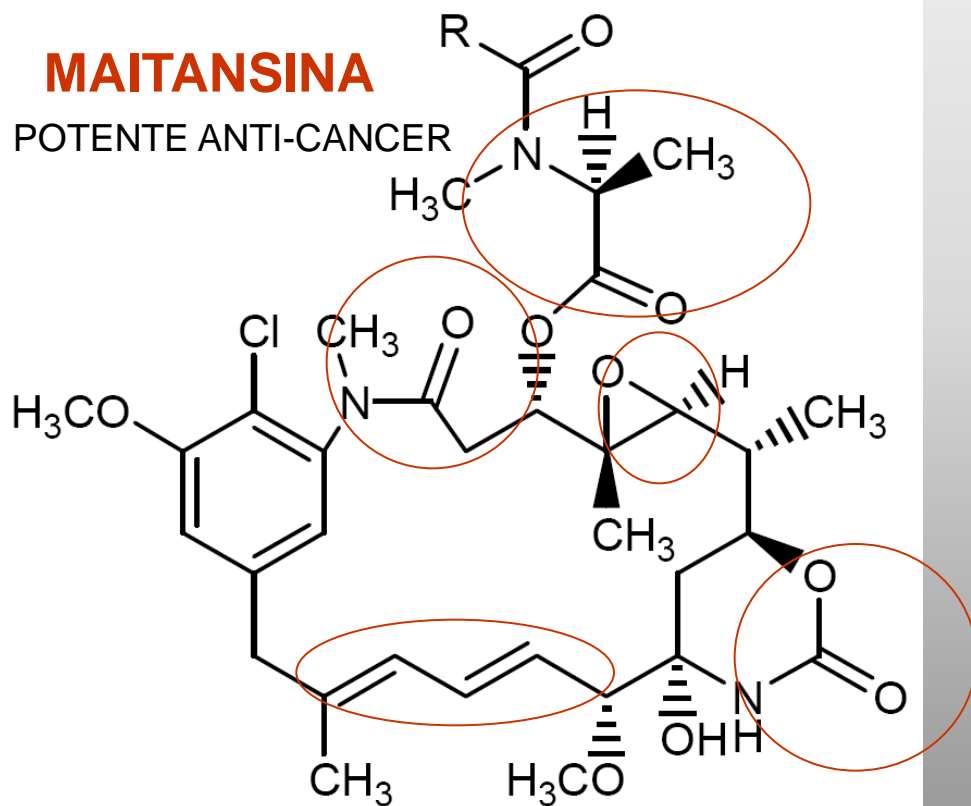
O QUÍMICO ORGÂNICO SINTÉTICO TEM QUE ESTAR APTO PARA RECONHECER A REATIVIDADE ESPECÍFICA DE CADA GRUPO FUNCIONAL PARA PROPOR E PROMOVER REAÇÕES SELETIVAS.



PARA CONSTRUIR UMA MOLÉCULA COMPLEXA, TAL COMO O **PRODUTO NATURAL** ABAIXO, TEMOS QUE SER CAPAZES DE COLOCAR OS GRUPOS FUNCIONAIS NOS LUGARES CERTOS DA MOLÉCULA, INCLUSIVE COM A ESTEREOQUÍMICA CORRETA, O QUE É UM GRANDE DESAFIO A SER VENCIDO

MAITANSINA

POTENTE ANTI-CANCER



PARA SER CAPAZ DE SINTETIZAR UMA MOLÉCULA, COMO AS QUE VIMOS ATÉ ENTÃO, TEMOS QUE SER CAPAZES DE CONHECER REAÇÕES SELETIVAS (QUIMIO-, REGIO- E ESTEREOSELETIVAS), O QUE É, TAMBÉM, UM DOS OBJETIVOS DESTA CURSO.

EXERCÍCIO:

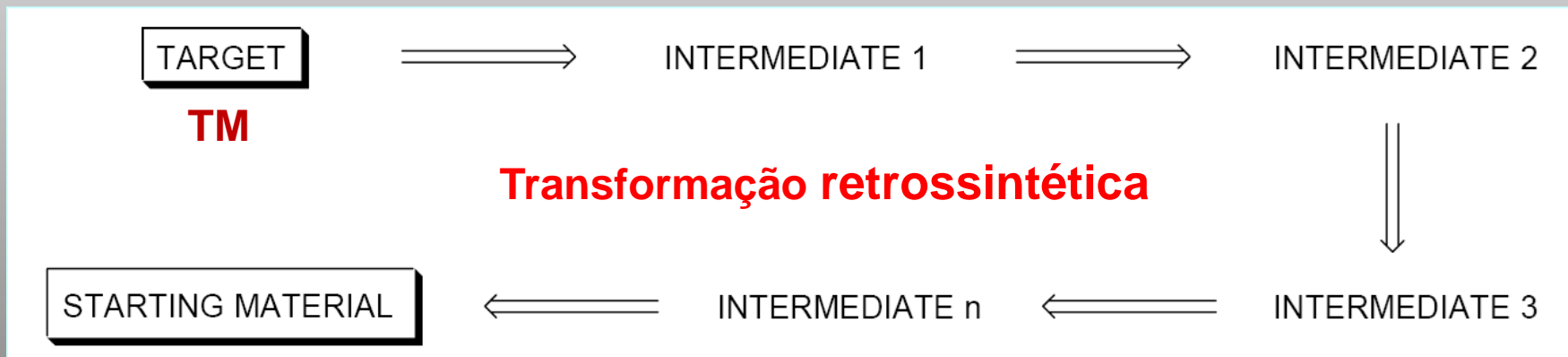
IDENTIFICAR ALGUNS GRUPOS FUNCIONAIS DA MAITANSINA

TERMOS BÁSICOS DE SÍNTESE ORGÂNICA

SÍNTESE / RETROSSÍNTESE

• “Retrossíntese”

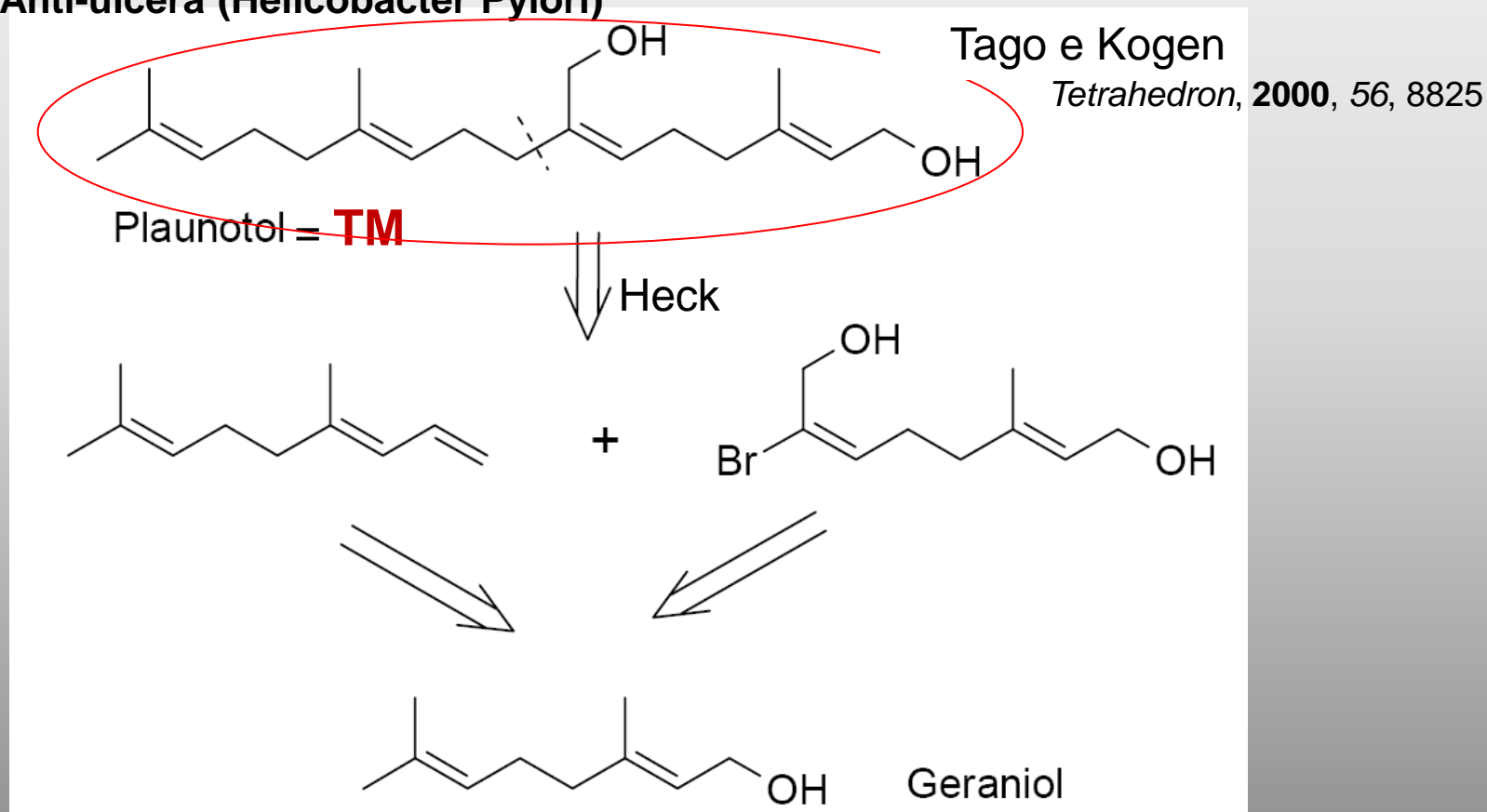
Técnica que decompõe a estrutura de uma molécula alvo (TM) em uma seqüência de estruturas progressivamente mais simples ao longo de uma rota que conduz, em último estágio, a materiais de partida mais simples ou comercialmente disponíveis para o planejamento racional de uma síntese química.



● “TM”

Synthetic Target Molecule – Molécula Alvo Molécula natural ou sintética a ser sintetizada

Anti-úlceras (Helicobacter Pylori)



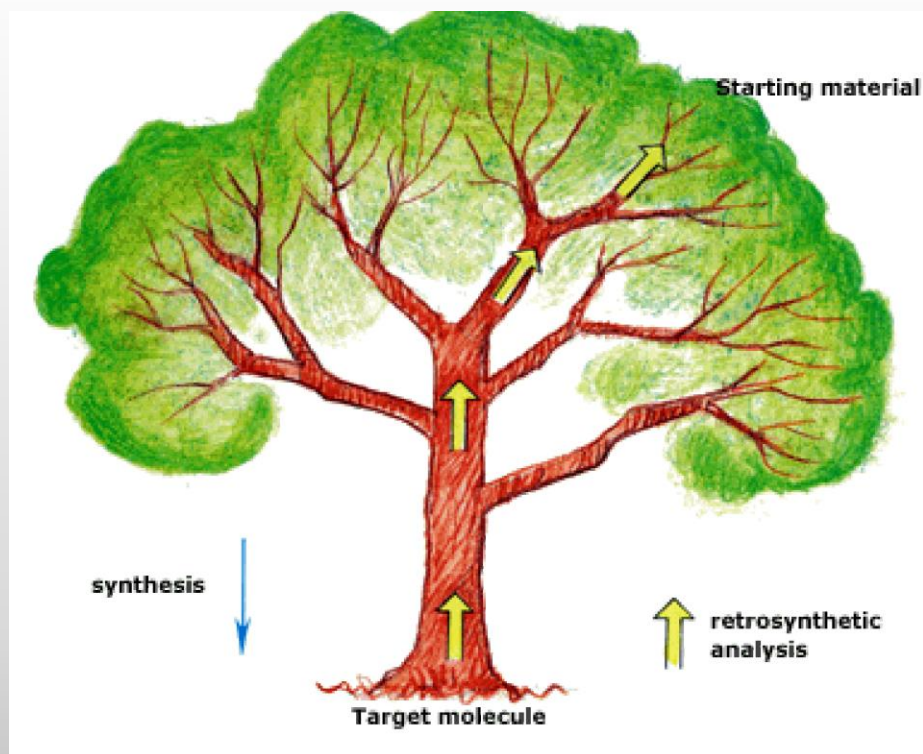
● “Disconnection”

Desconexão – Operação inversa ao da síntese

Símbolo: 

● “FGI”

Functional Group Intercoversion
(Interconversão de Grupos Funcionais): Processo de converter um grupo funcional em um outro, por meio de reações de substituição, adição, eliminação, redução ou oxidação.



Cada estrutura derivada de uma TM, se transforma em uma outra TM, para sofrer mais uma análise ou retrossíntese adicional. A repetição do processo produz uma árvore de intermediários que têm estruturas químicas nos nós e possíveis transformações químicas como caminho, partindo do fundo (copa) para a TM. Deve-se evitar ramificações e proliferações excessivas de rotas inúteis. As estratégias para o controle e a orientação são de extrema importância.

- **“Estratégia Sintética”**

**Seria a escolha do caminho ao longo da árvore retrossintética:
planejamento sintético**

- **“Synthetic Tactics = Tática ”**

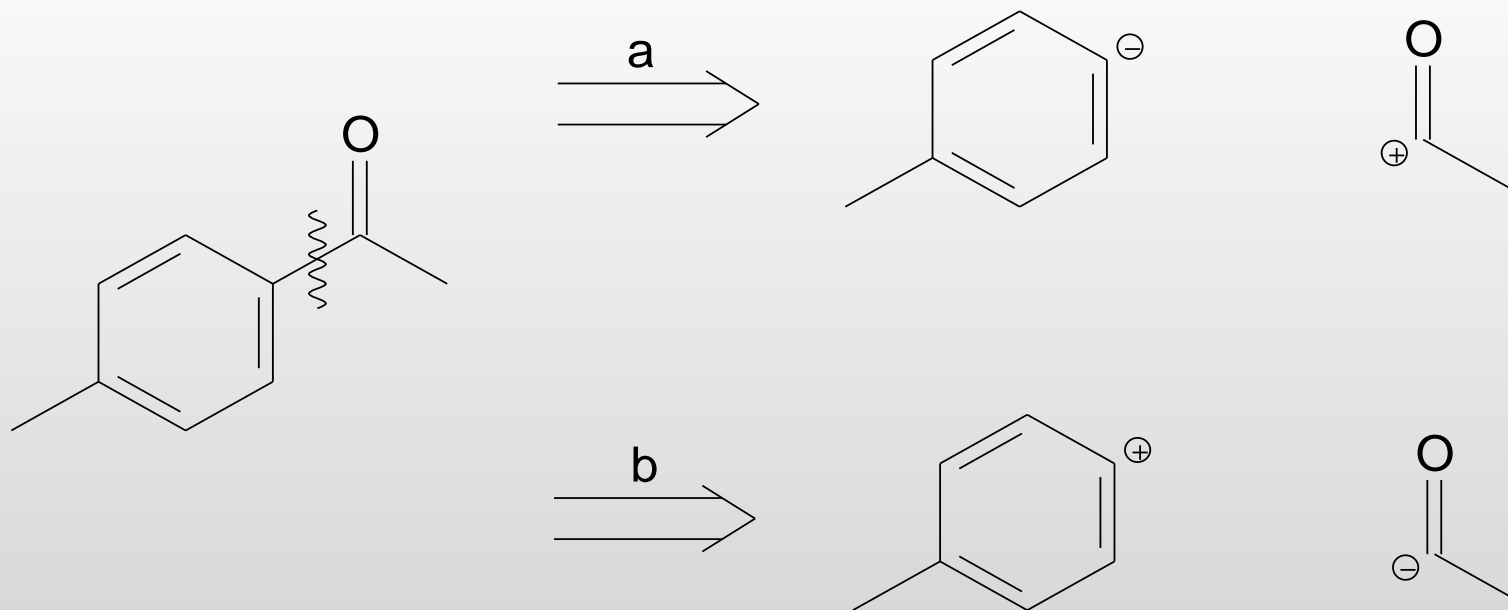
Projetar eficientemente a criação de uma ligação ou um conjunto de ligações para uma determinada região da TM.

- **"Synthon"**

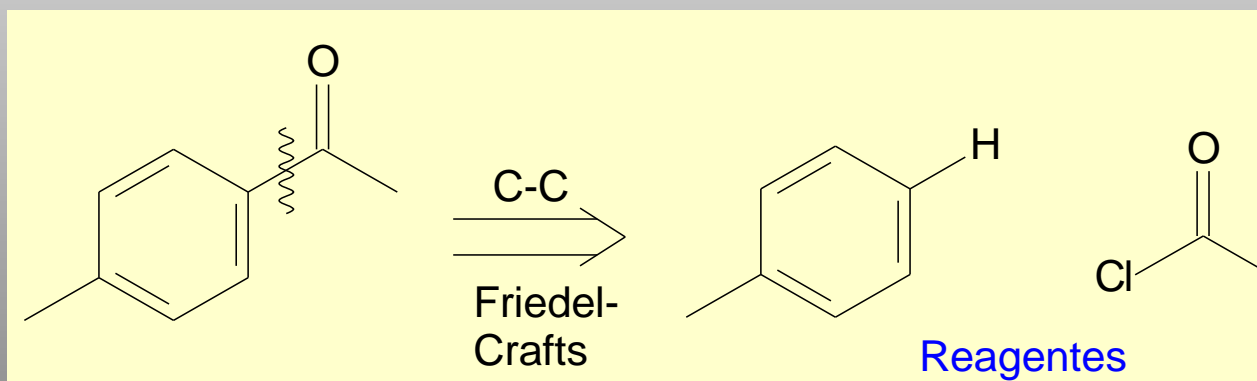
Fragmento idealizado (geralmente um íon) o qual pode ser ou não um intermediário da reação.

- **Equivalente Sintético**

Reagente contendo a função de um "Synthon", o qual não pode ser usado por ser muito instável.



"Synthons"



Reagentes

Motivos para sintetizar uma substância

- 1) A substância nunca foi sintetizada
- 2) Aplicar uma nova estratégia sintética
- 3) Para comprovar a estrutura de um dado composto
- 4) Pelo interesse na molécula em si própria
(econômico, biológico, etc.)

Economia: (Rendimento e Planejamento)

1) Menor número de operações químicas

Diminuir:

- Construções
- Refuncionalizações
- Uso de grupos protetores

2) Resolução de intermediários quirais deve ser feita o quanto antes

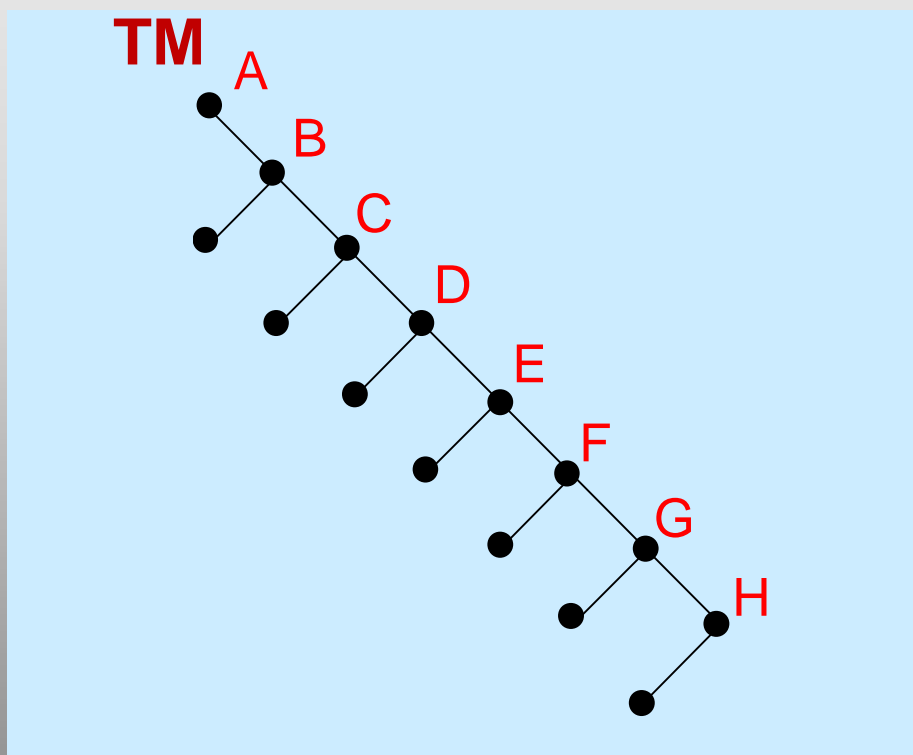
3) Ciclizações devem ser feitas o mais cedo possível

4) Considerar o tipo de síntese:

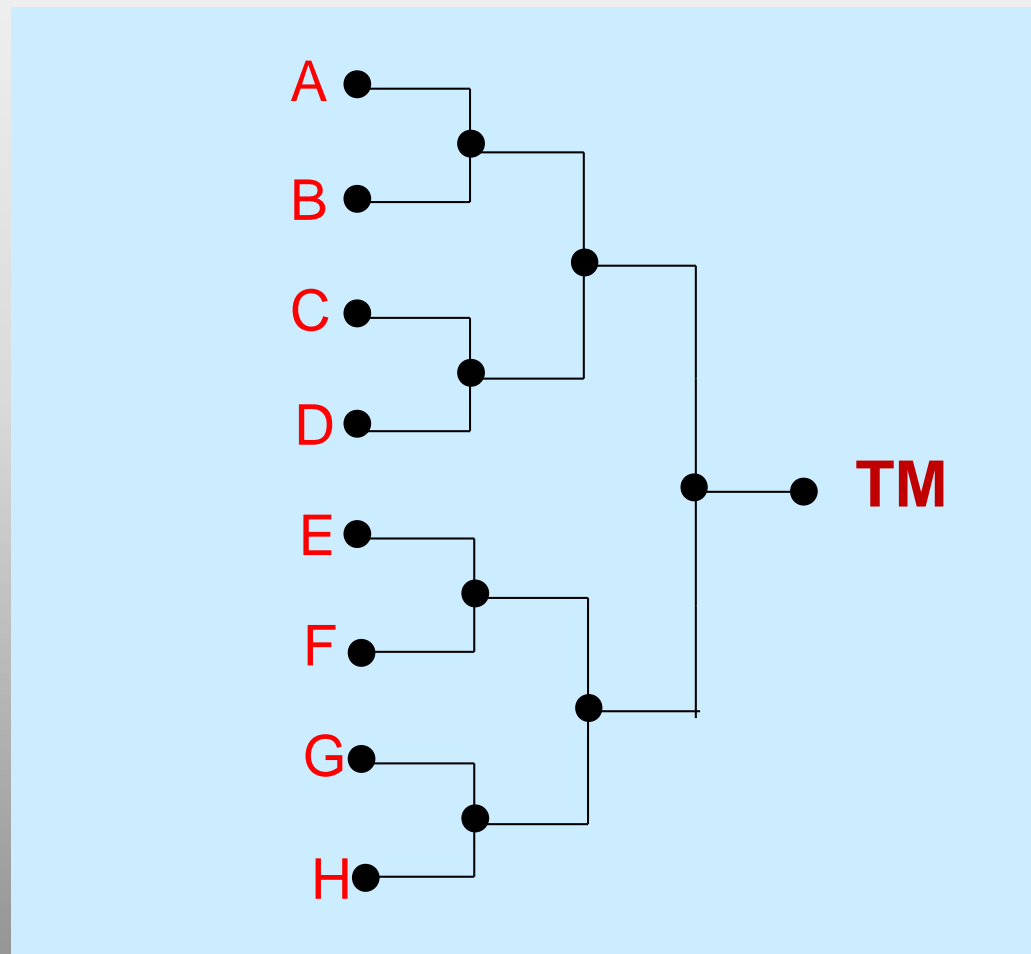
- Linear
- Convergente

Tipos de Síntese

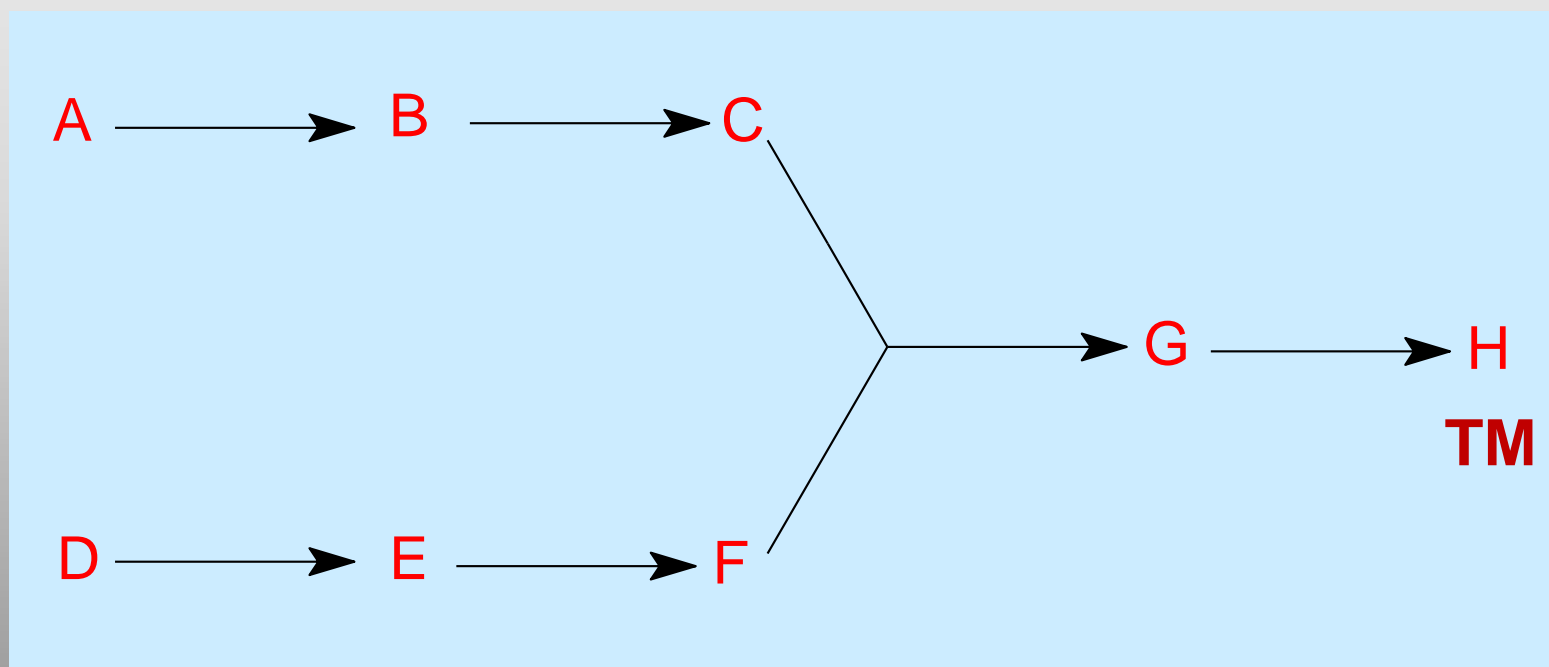
a) Linear (Trabalho em Série)



b) Convergente (Trabalho em Paralelo)

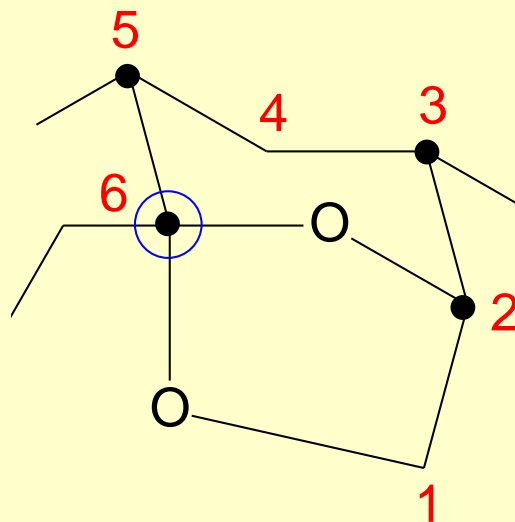


Síntese Parcialmente Convergente



Análise (Retrossíntese)

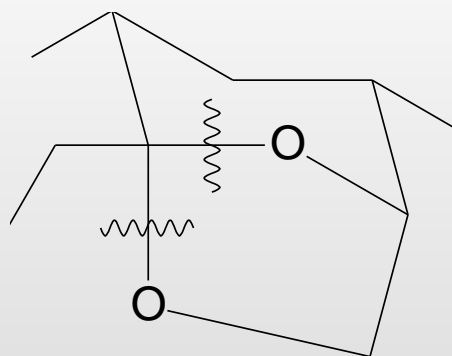
- a) Reconhecer os grupos funcionais na “molécula alvo”;
- b) Efetuar a desconexão por métodos correspondentes a reações conhecidas;
- c) Repetir "a" e "b" se for necessário para atingir matérias-primas disponíveis.



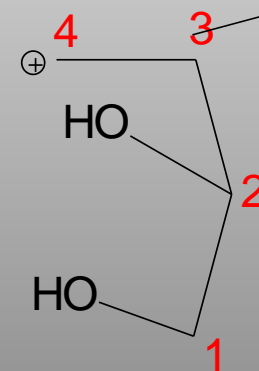
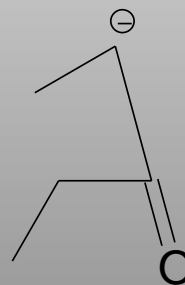
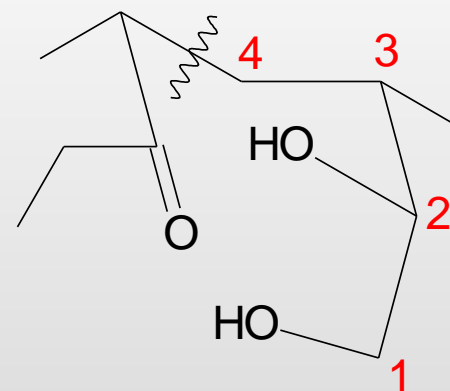
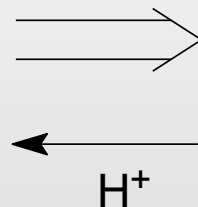
(1)
MULTISTRIATINA

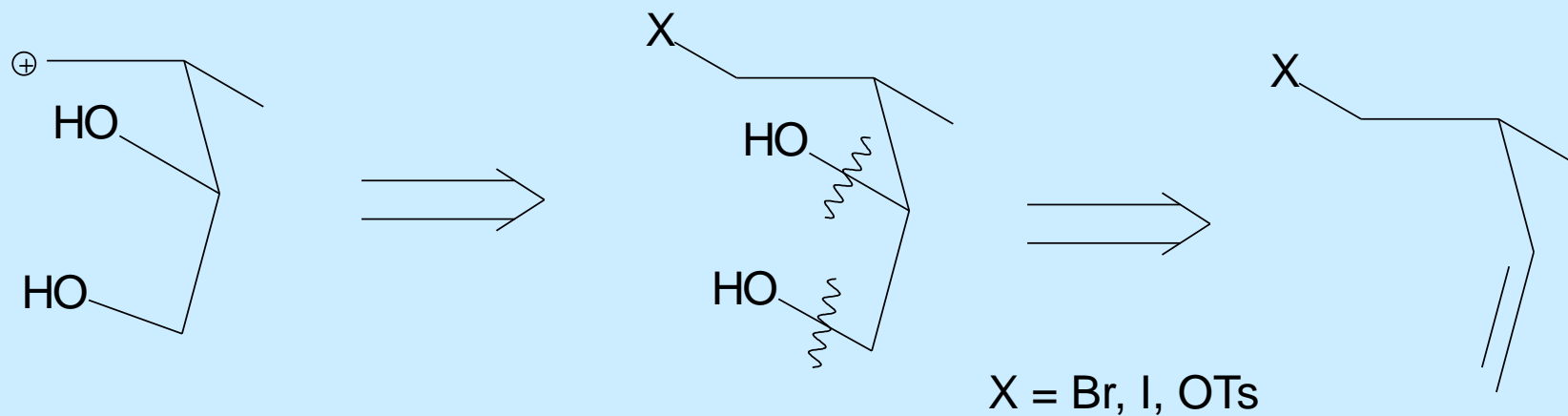
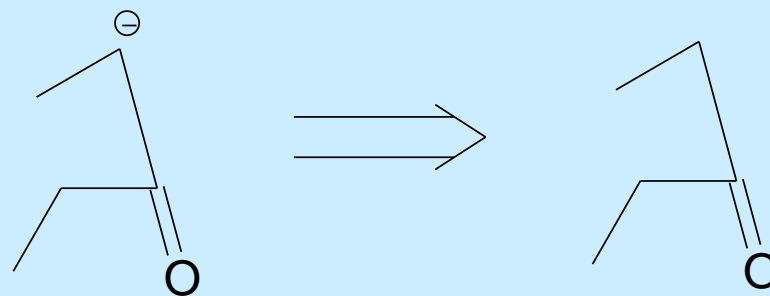
Feromônio

RETROSSÍNTESE



TM = Multistriatina

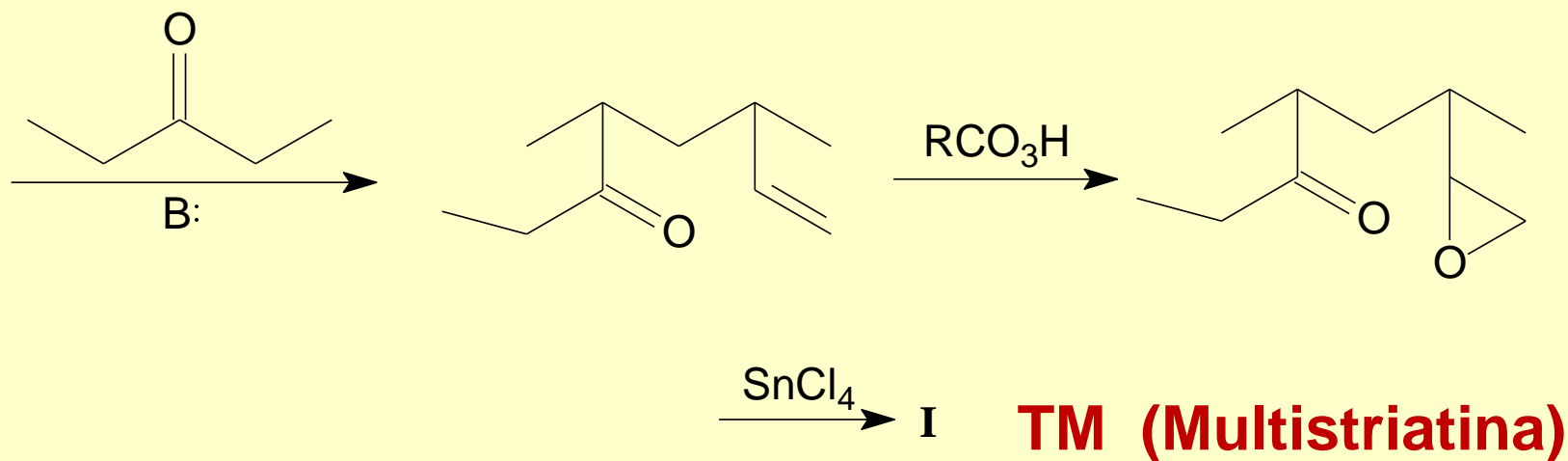
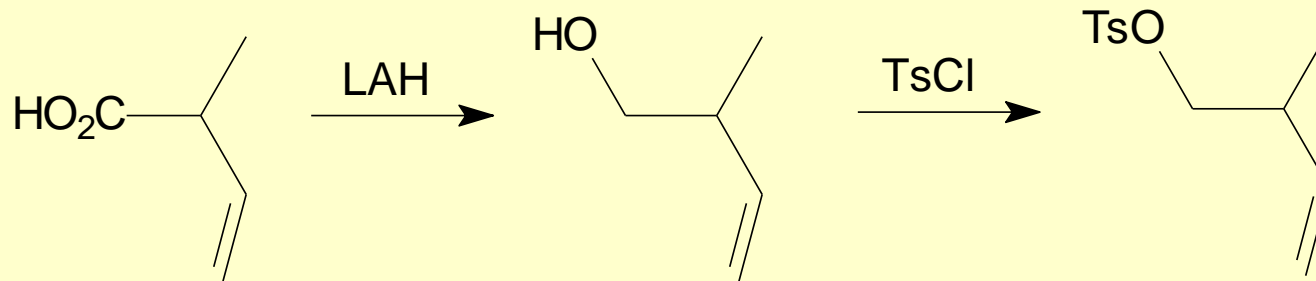




Síntese

- a) Escrever o plano de acordo com a análise, acrescentando reagentes e condições
- b) Modificar o plano de acordo com os fatores inesperados ou com os sucessos no laboratório

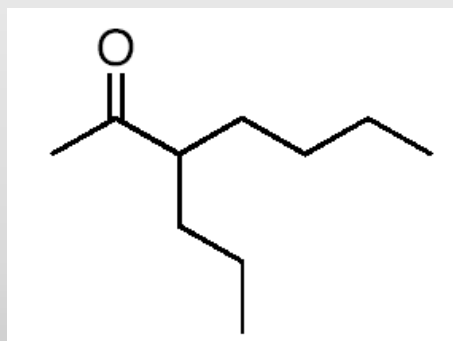
SÍNTESE



Exercícios

Use análise retrossintética para identificar um material de partida para cada composto abaixo :

- Partindo de, no máximo, 5 carbonos:



-Partindo da cicloexanona:
(dica: Bayer Villiger)

