



**FCAV/ UNESP**

**DISCIPLINA:** Química Orgânica

**ASSUNTO:** Isomeria

Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Luciana Maria Saran

# 1. ISÔMEROS

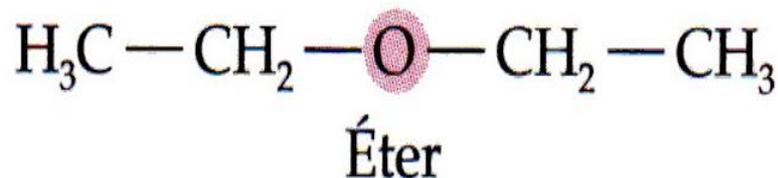
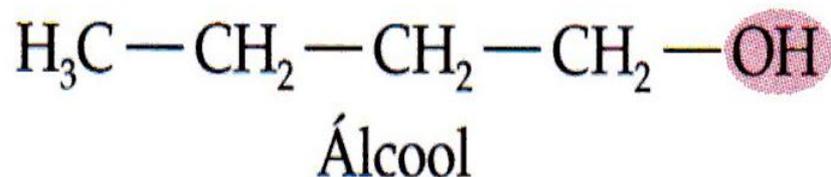
- ✓ **Isômeros:** dois ou mais *compostos diferentes* que apresentam a *mesma fórmula molecular*.
- ✓ **Isomeria *plana* ou *constitucional*.**
- ✓ ***Estereoisomeria:***
  - Isomeria geométrica;
  - Isomeria ótica.

## 2. ISÔMERIA CONSTITUCIONAL OU ISOMERIA PLANA

- ✓ Pode ser percebida observando-se a fórmula estrutural plana dos compostos.
- ✓ ***Isômeros constitucionais*** diferem na maneira com que seus átomos estão conectados.

## 2. ISÔMERIA CONSTITUCIONAL OU ISOMERIA PLANA

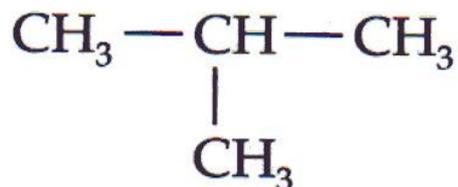
### ✓ Exemplo 1:



- **Isômeros de fórmula molecular:  $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$ .**
- **Não pertencem à mesma classe funcional.**

## 2. ISÔMERIA CONSTITUCIONAL OU ISOMERIA PLANA

### ✓ Exemplo 2:



Cadeia ramificada

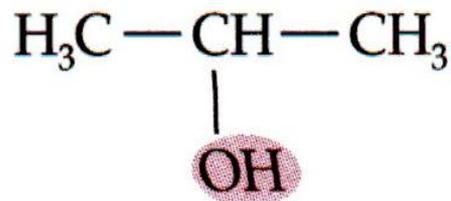
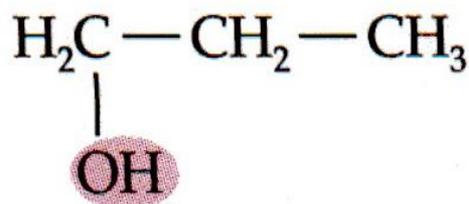


Cadeia normal

- **Isômeros de fórmula molecular:  $\text{C}_4\text{H}_{10}$ .**
- **Diferem na classificação da cadeia carbônica.**

## 2. ISÔMERIA CONSTITUCIONAL OU ISOMERIA PLANA

### ✓ Exemplo 3:



- Isômeros de fórmula molecular:  $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$ .
- Diferem na posição do grupo - OH.

## 2. ISÔMERIA CONSTITUCIONAL OU ISOMERIA PLANA

### ✓ Exemplo 4:



• Isômeros de fórmula molecular:  $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$ .

• Diferem na posição do heteroátomo.

### 3. ISOMERIA ESPACIAL OU ESTEREOISOMERIA

- ✓ Caracteriza-se pela existência de **diferentes compostos**, que embora apresentem **fórmulas moleculares e estruturais idênticas**, apresentam **diferentes arranjos espaciais dos átomos**.
- ✓ **Classificação:**
  - isomeria geométrica (ou *cis-trans*);
  - isomeria ótica.

## 3. ISOMERIA ESPACIAL OU ESTEREOISOMERIA

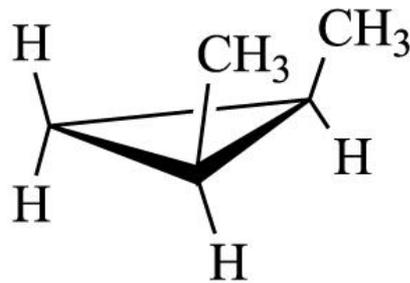
### 3.1. ISOMERIA GEOMÉTRICA (*cis-trans*)

- ✓ A isomeria geométrica ocorre devido à diferente disposição espacial dos átomos em cadeias **insaturadas** ou **cíclicas**.
- ✓ Isômeros geométricos apresentam fórmulas estruturais planas idênticas, mas diferentes propriedades físicas.

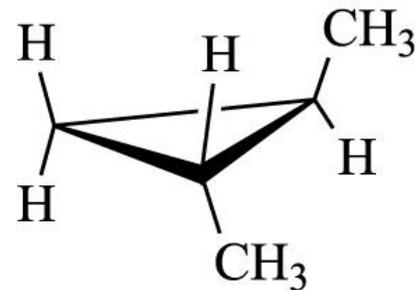
## 3.1. ISOMERIA GEOMÉTRICA (*cis-trans*)

### 3.1.1. Em Compostos Cíclicos

- ✓ Compostos cíclicos substituídos podem apresentar isômeros conforme ilustrado para as moléculas do 1,2-dimetilciclopropano:



(A)

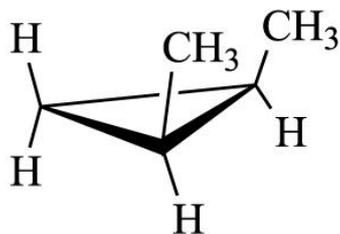


(B)

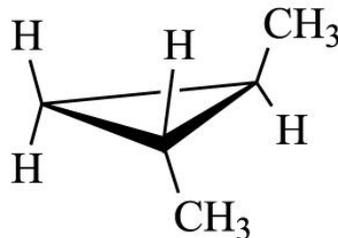
**Fonte:** BARBOSA, 2004 : p. 50.

## 3.1. ISOMERIA GEOMÉTRICA (*cis-trans*)

### 3.1.1. Em Compostos Cíclicos



(A)



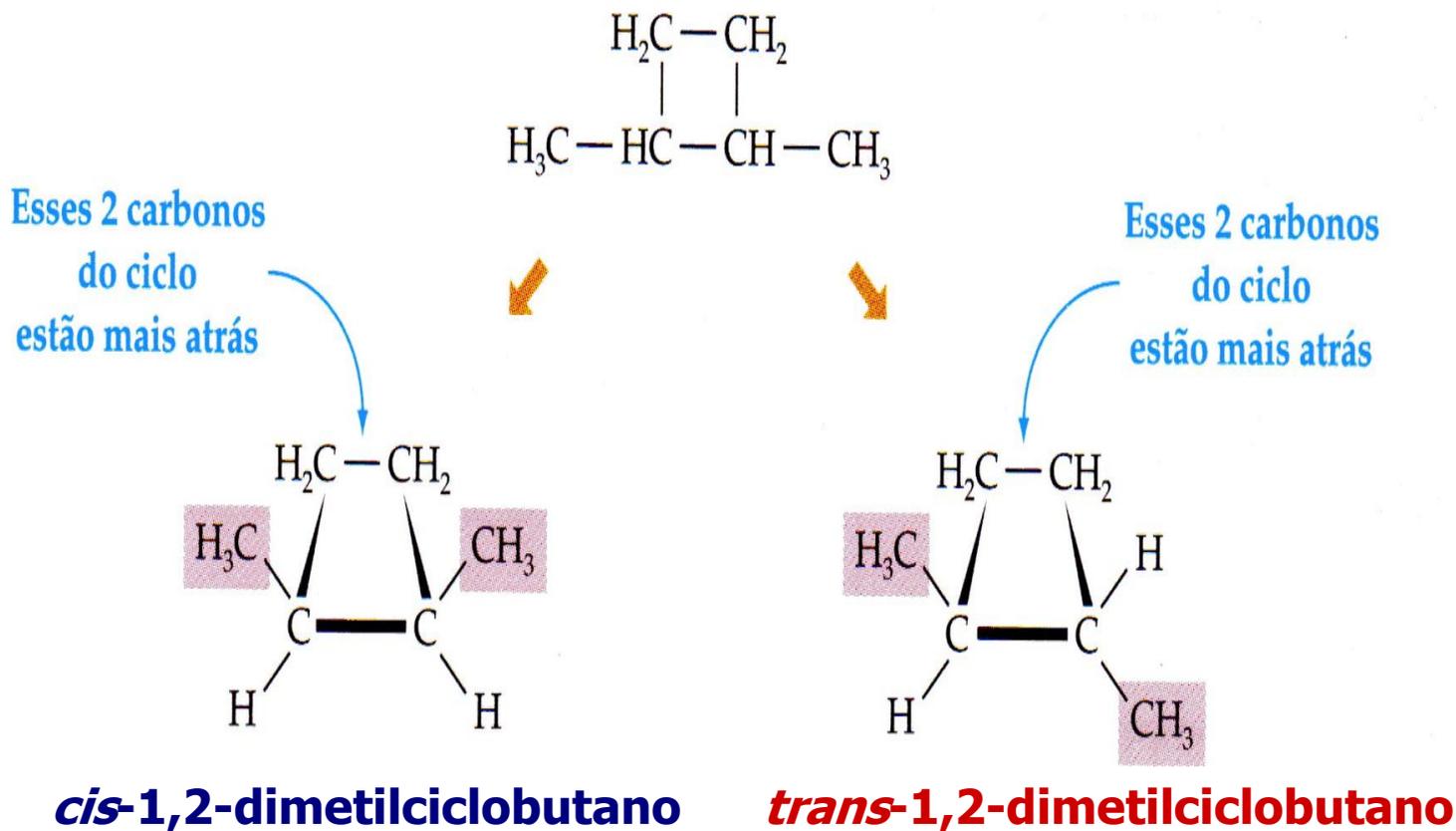
(B)

- ✓ No **composto A** os dois grupos metila encontram-se em um mesmo lado de um plano que passa pelos átomos de carbono do anel. Nesse caso, deve ser usado o prefixo **cis** antes do nome do composto e seu **nome completo** será: **cis-1,2-dimetilciclopropano**.
- ✓ No **composto B** os dois grupos metila encontram-se em lados opostos do plano que passa pelos átomos de carbono do anel, usando-se, nesse caso, o prefixo **trans** para designar tal isômero. Seu nome completo é, portanto: **trans-1,2-dimetilciclopropano**.



# 3.1. ISOMERIA GEOMÉTRICA (*cis-trans*)

## 3.1.1. Em Compostos Cíclicos

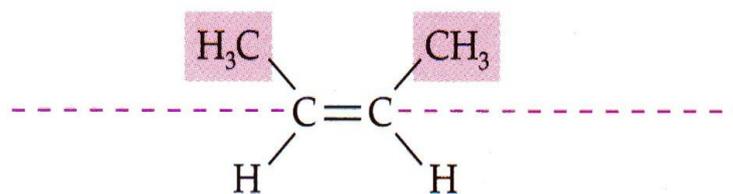


Fonte: PERUZZO, 2006 : p. 287.

## 3.1. ISOMERIA GEOMÉTRICA (*cis-trans*)

### 3.1.2. Em Compostos com Ligação Dupla C = C

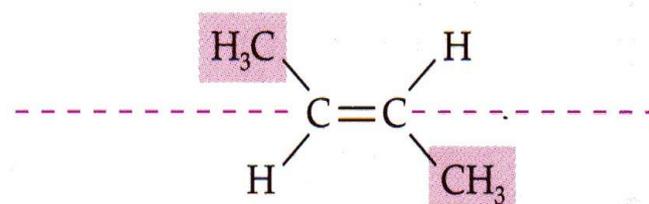
- ✓ Para que uma dada fórmula estrutural plana permita a existência de isômeros geométricos, é necessário, além da presença de uma ligação dupla, que cada um dos carbonos da dupla apresente dois ligantes diferentes entre si.
- ✓ **Exemplo 1:** but-2-eno ( $\text{H}_3\text{C} - \text{CH} = \text{CH} - \text{CH}_3$ )



*cis*-but-2-eno

**TF = - 139°C**

**TE = 3,7°C**



*trans*-but-2-eno

**TF = - 105°C**

**TE = 1°C**

**Fonte:** PERUZZO, 2006 : p. 286.

## 3.1. ISOMERIA GEOMÉTRICA (*cis-trans*)

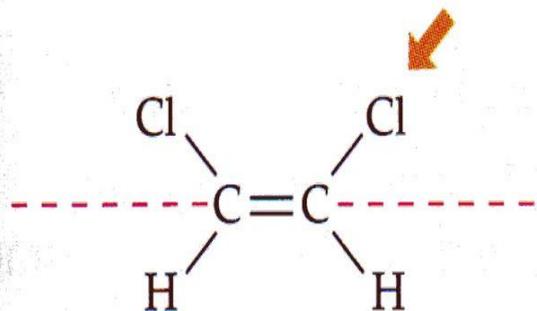
### 3.1.2. Em Compostos com Ligação Dupla C = C

(1,2-dicloroeteno)



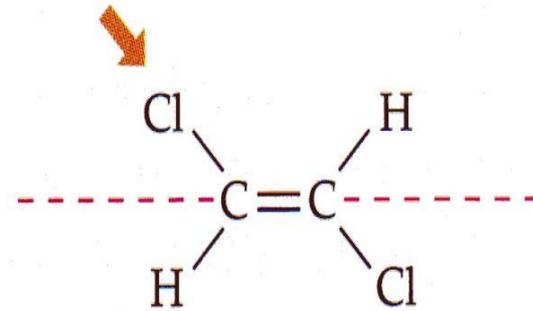
Fórmula estrutural plana

(que, neste caso, representa dois compostos diferentes)



(*cis*-1,2-dicloroeteno)

Estruturas mostrando a geometria dos isômeros



(*trans*-1,2-dicloroeteno)

### 3.1.2. Isomeria Geométrica em Compostos com Ligação Dupla C = C

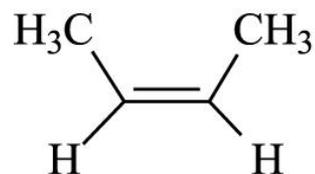
Isômero	<i>cis</i> -1,2-dicloroeteno	<i>trans</i> -1,2-dicloroeteno
Fórmula Molecular	$C_2H_2Cl_2$	$C_2H_2Cl_2$
Massa Molar	97 g/mol	97 g/mol
Ponto de Fusão	- 80°C	- 50°C
Ponto de Ebulição	60°C	49°C
Densidade	1,28 g/cm <sup>3</sup>	1,26 g/cm <sup>3</sup>

## 3.1.2. Isomeria Geométrica em Compostos com Ligação Dupla C = C

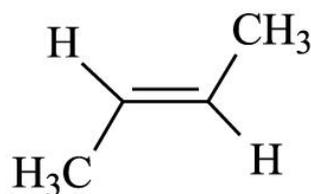
- ✓ **Nomenclatura:** uso dos prefixos *cis* e *trans*
  - Para designar alquenos dissustituídos estereoisoméricos, utilizam-se os prefixos *cis* e *trans*.
  - O prefixo *cis* é usado quando os grupos ligados aos carbonos da dupla encontram-se de um mesmo lado do plano que passa pelos carbonos.
  - O prefixo *trans* é utilizado quando tais grupos encontram-se em lados opostos do referido plano.

## 3.1.2. Isomeria Geométrica em Compostos com Ligação Dupla C = C

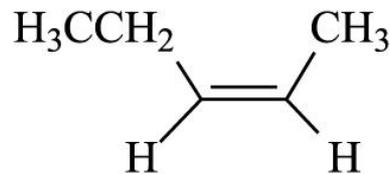
### ✓ Alquenos Dissubstituídos



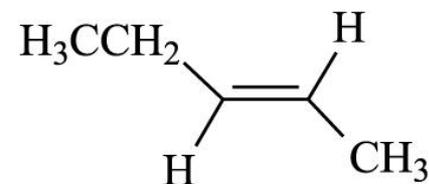
*cis*-but-2-eno



*trans*-but-2-eno



*cis*-pent-2-eno



*trans*-pent-2-eno

**Fonte:** BARBOSA, 2004 : p. 67.

- ✓ Os termos ***cis*** e ***trans*** são usados ***apenas para alquenos dissubstituídos***.

## 3.1.2. Isomeria Geométrica em Compostos com Ligação Dupla C = C

- ✓ **Nomenclatura:** uso dos prefixos **E** e **Z**
  - Para designar alquenos **tri** e **tetrassubstituídos** utiliza-se outro sistema de nomenclatura, denominado **E-Z**.
  - No sistema **E-Z** são examinados os grupos ligados a cada átomo de carbono da dupla ligação e colocados em ordem de prioridade.
  - Os átomos de maior número atômico têm maior prioridade. Ordem decrescente de prioridade:



## 3.1.2. Isomeria Geométrica em Compostos com Ligação Dupla C = C

✓ **Nomenclatura:** uso dos prefixos **E** e **Z**

- No caso de átomos de mesmo número atômico, o isótopo de maior número de massa tem maior prioridade: **T > D > H**                       **$^{14}\text{C} > ^{13}\text{C} > ^{12}\text{C}$**
- Quando os átomos ligados aos carbonos da ligação dupla forem iguais, os números e as massas atômicas dos elementos ligados a esses átomos são usados para realizar o desempate.

## 3.1.2. Isomeria Geométrica em Compostos com Ligação Dupla C = C

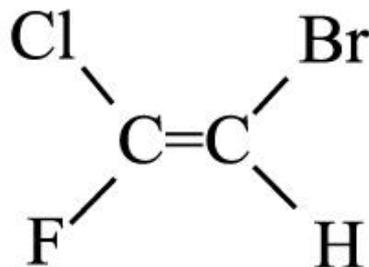
- ✓ **Nomenclatura:** uso dos prefixos **E** e **Z**
  - No sistema **E-Z**, examinam-se os dois átomos ou grupos ligados em cada um dos carbonos da ligação dupla e determina-se a ordem de prioridade de cada um deles.
  - Se os grupos de maior prioridade em cada carbono estiverem do mesmo lado de um plano imaginário passando por esses carbonos, a geometria dessa dupla ligação será designada pela letra **Z** (do alemão *Zusammen*, "**juntos**").

## 3.1.2. Isomeria Geométrica em Compostos com Ligação Dupla C = C

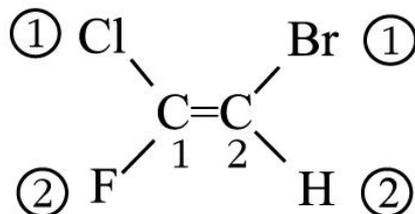
✓ **Nomenclatura:** uso dos prefixos **E** e **Z**

- Se os grupos de maior prioridade em cada carbono estiverem em lados opostos da dupla ligação, a geometria da ligação será designada pela letra **E** (do alemão *Entgegen*, "**opostos**").

- **Exemplo 1:**



## 3.1.2. Isomeria Geométrica em Compostos com Ligação Dupla C = C



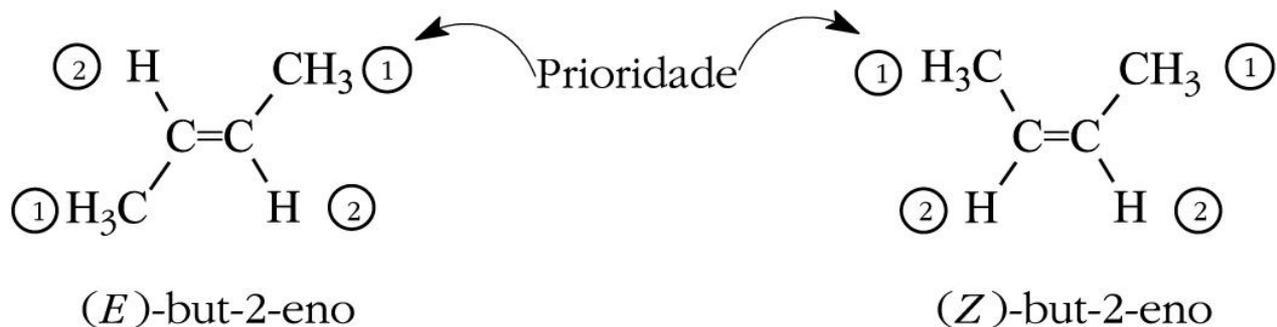
### **(Z)-2-bromo-1-cloro-1-fluoroeteno**

✓ **No exemplo acima:**

- Os átomos ligados ao **C1** são Cl (prioridade 1) e F (prioridade 2) e os ligados ao **C2**, Br (prioridade 1) e H (prioridade 2).
- Como os grupos de maior prioridade ligados ao **C1** (Cl) e **C2** (Br) se encontram no mesmo lado de um plano que passa por esses carbonos, o isômero acima recebe a denominação **Z** e seu nome completo é: **(Z)-2-bromo-1-cloro-1-fluoroetano**.

## 3.1.2. Isomeria Geométrica em Compostos com Ligação Dupla C = C

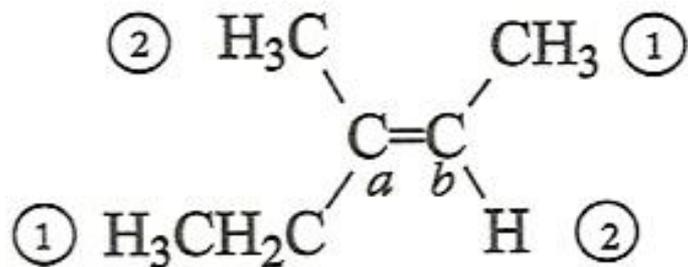
### - Exemplo 2:



**Fonte:** BARBOSA, 2004 : p. 69.

## 3.1.2. Isomeria Geométrica em Compostos com Ligação Dupla C = C

### - Exemplo 3:

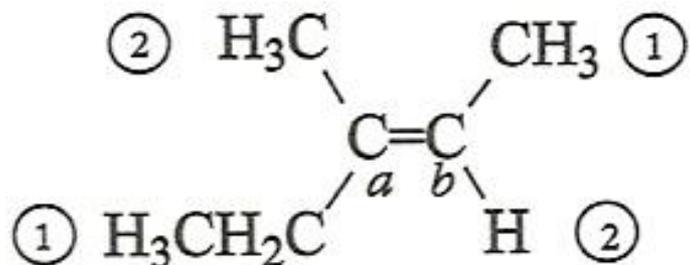


### ✓ No exemplo acima:

- Os grupos ligados ao carbono **a** são – CH<sub>3</sub> e – CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>. Em ambos, o elemento ligado diretamente ao carbono **a** é um átomo de **C**. Portanto, devem ser comparadas as prioridades dos elementos ligados a cada um desses carbonos.

## 3.1.2. Isomeria Geométrica em Compostos com Ligação Dupla C = C

### - Exemplo 3:



### ✓ No exemplo acima:

- No grupo – CH<sub>3</sub>, os elementos ligados ao C são H, H, H e no grupo – CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, são C, H, H. Como o carbono tem prioridade maior que o hidrogênio, o grupo etil terá prioridade sobre o metil. Dessa forma, o isômero apresentado é o: (*E*)-3-metilpent-2-eno.

### 3. ISOMERIA GEOMÉTRICA

- ✓ Quando um composto com atividade biológica apresenta possibilidade de isomeria geométrica, freqüentemente apenas um dos dois isômeros tem tal atividade.
- ✓ Este é o caso, por exemplo, de alguns **feromônios**.
- ✓ **Feromônios** são substâncias químicas produzidas e secretadas por indivíduos de uma determinada espécie.



### 3. ISOMERIA GEOMÉTRICA



- ✓ *Feromônios* de insetos podem ser usados neste tipo de armadilha.
- ✓ Assim que o inseto, atraído pelo cheiro do ferômonio existente dentro dela, pousa sobre a sua superfície pegajosa, fica preso e morre.

**Fonte:** PERUZZO, 2006 : p. 296.

## 4. ISOMERIA ÓTICA

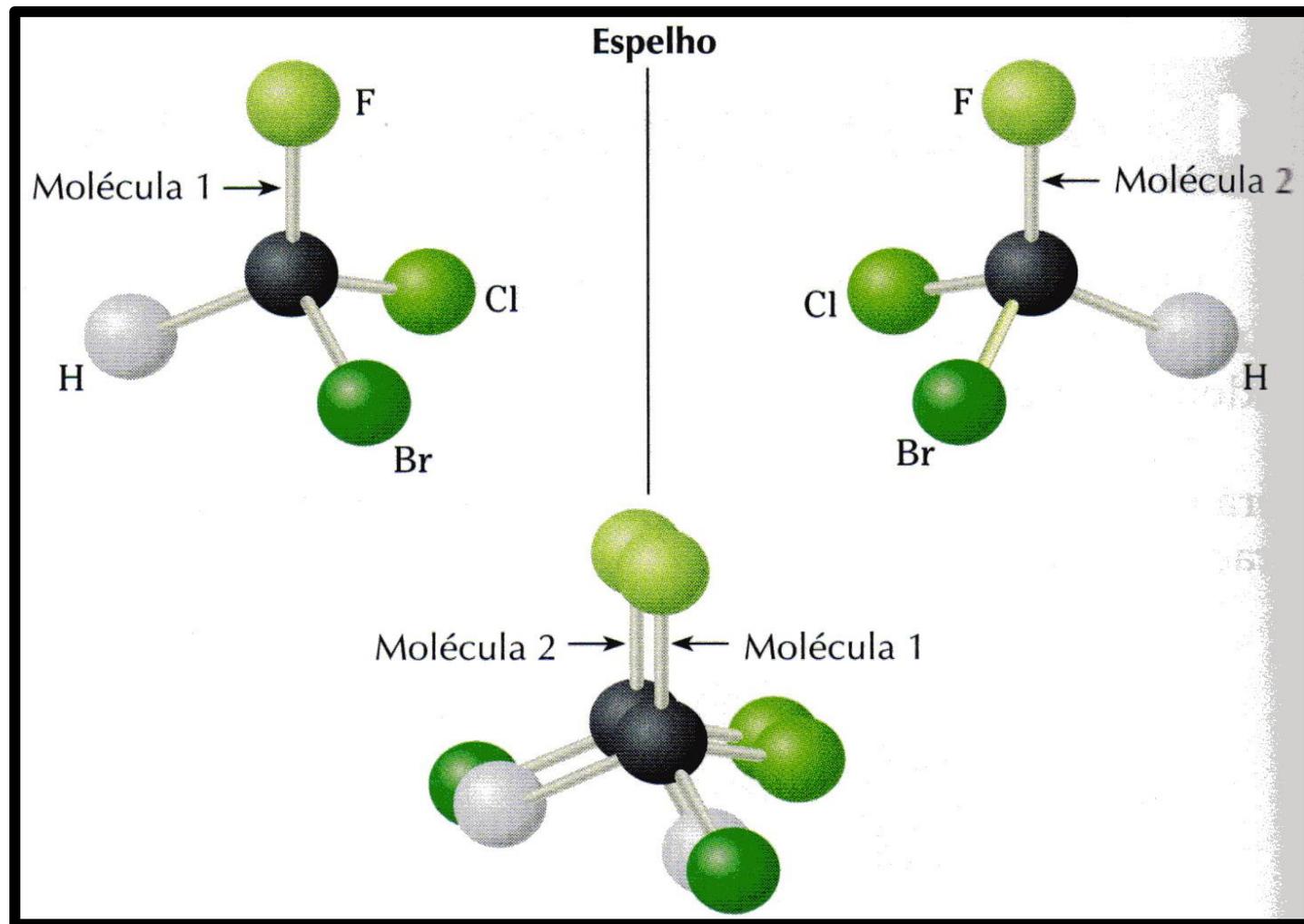
- ✓ Tipo de isomeria em que uma molécula é a imagem especular da outra.
- ✓ Ocorre em moléculas que não apresentam plano de simetria (moléculas assimétricas).
- ✓ **Isômeros Óticos** ou **Enantiomorfos** ou **Enantiômeros**.

## 4. ISOMERIA ÓTICA

✓ **EXEMPLO:** molécula de CHBrClF.

- Esta molécula não apresenta nenhum plano de simetria.
- É denominada ***molécula assimétrica*** ou ***molécula quiral***.
- Se a colocarmos diante de um espelho, a imagem especular será diferente dela.

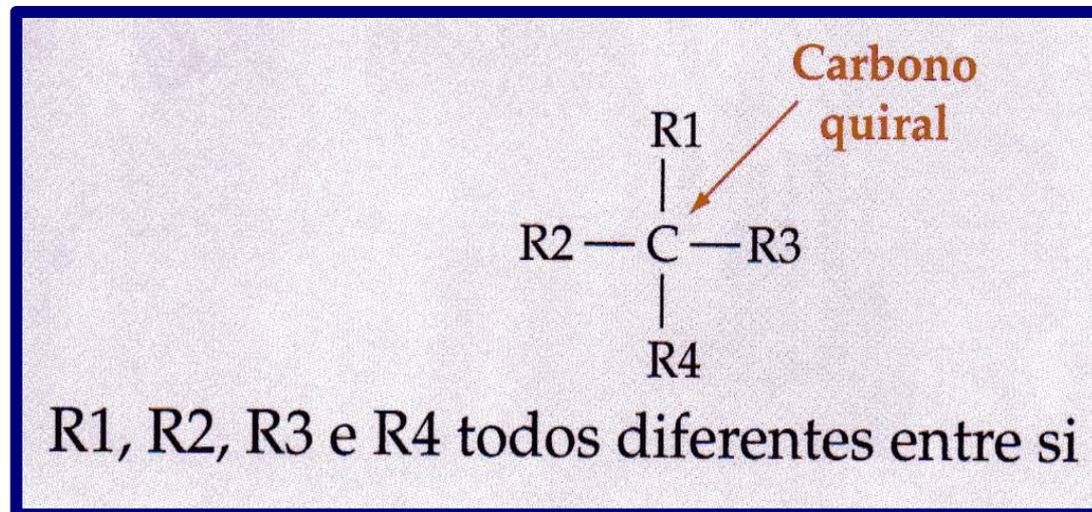
# 4. ISOMERIA ÓTICA



Fonte: PERUZZO, 2006 : p. 300.

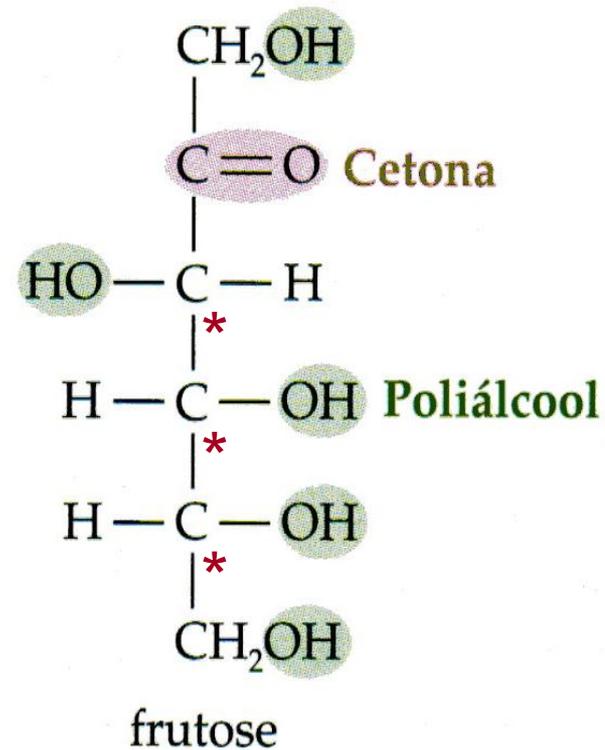
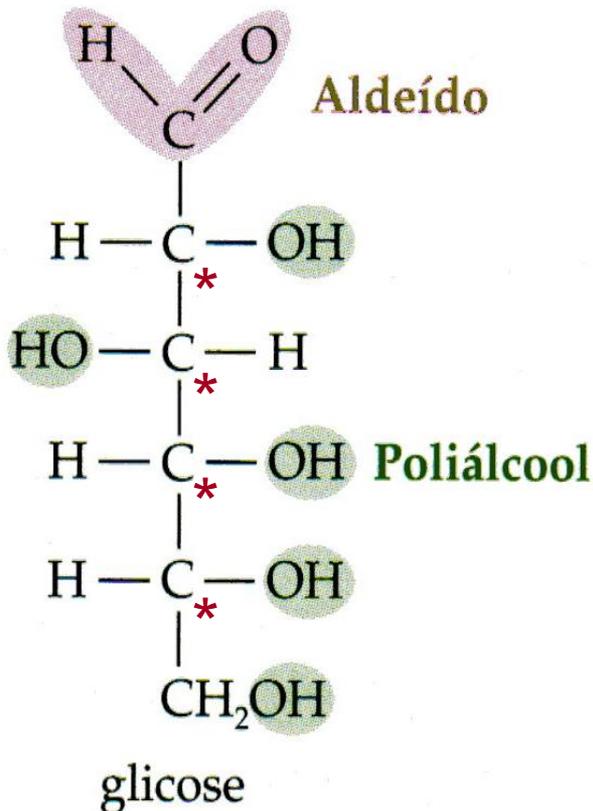
## 4. ISOMERIA ÓTICA

- ✓ Condição para haver isômeros óticos: presença de **carbono quiral** ou **assimétrico**.



# COMPOSTOS OTICAMENTE ATIVOS

✓ Exemplos: açúcares, incluindo a *sacarose*.

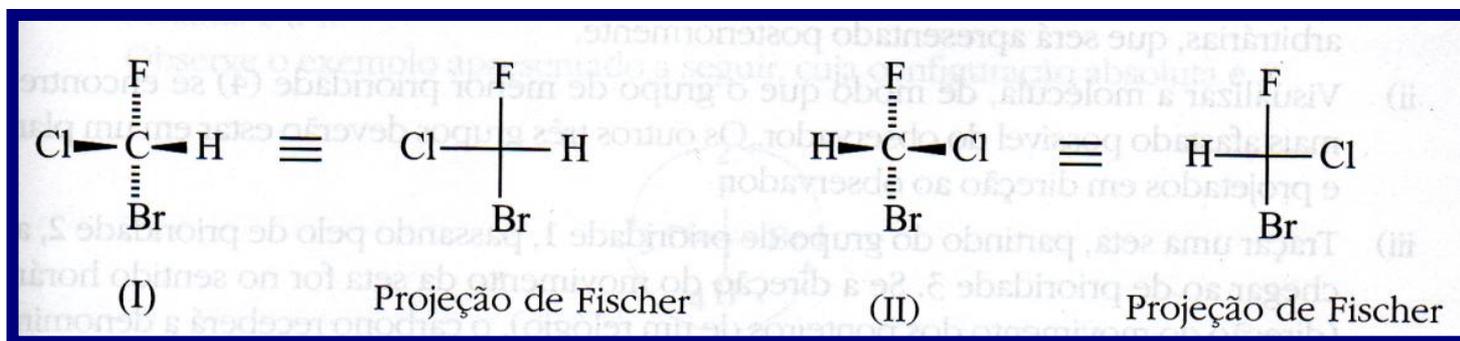


\*Este asterisco sinaliza os carbonos assimétricos.

# 4. ISOMERIA ÓTICA

## Representação de Enantiômeros

- ✓ Uma maneira muito simples para representar compostos orgânicos em duas dimensões foi introduzida pelo químico alemão Emmil Fischer e denomina-se **projeção de Fischer**.
- ✓ As projeções de Fischer para os compostos (I) e (II) são:



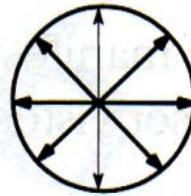
- ✓ Nessas projeções, as linhas na horizontal representam grupos que estão na frente do plano do papel e as linhas na vertical, os grupos que estão atrás do plano.

## 4. ISOMERIA ÓTICA

- ✓ As propriedades físicas (PF, PE e densidade de dois enantiômeros são iguais, **exceto** o desvio sobre a luz polarizada.
- ✓ Isômeros óticos desviam o plano de vibração da luz polarizada.
- ✓ Um dos enantiômeros desvia o plano da luz polarizada no sentido horário e o outro no anti-horário.

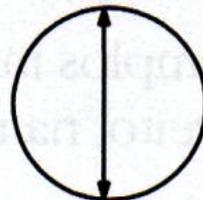
# POLARÍMETRO E DESVIO DA LUZ POLARIZADA

- ✓ A luz ou radiação comum é não polarizada, ou seja, vibra ou oscila em várias direções.



Luz não polarizada

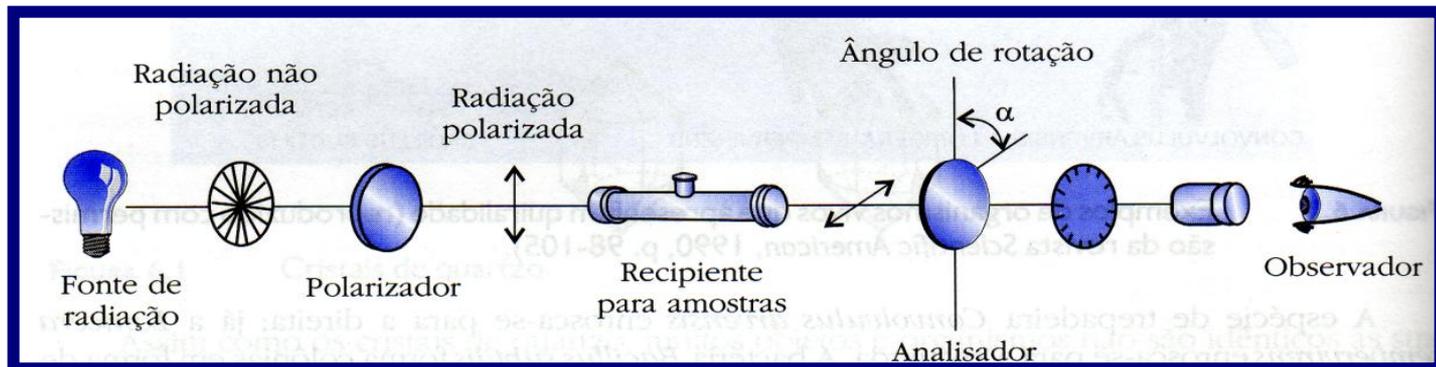
- ✓ A **luz** é denominada **polarizada** quando oscila em apenas uma direção.



Luz polarizada

# POLARÍMETRO E DESVIO DA LUZ POLARIZADA

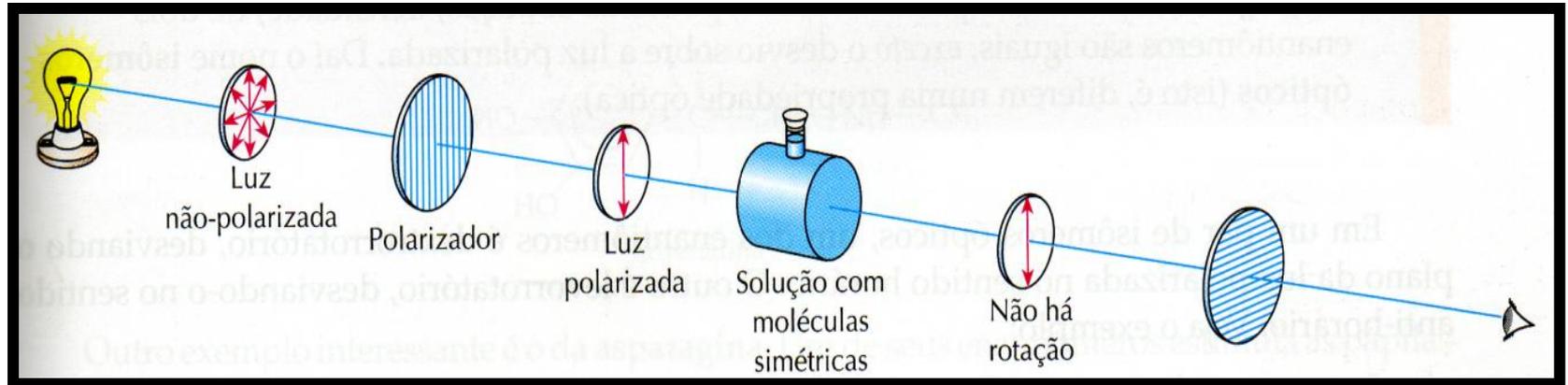
- ✓ A luz polarizada é obtida quando a luz atravessa lentes especiais denominadas polarizadores.
- ✓ Uma das propriedades características de moléculas quirais é a sua capacidade de desviar o plano de vibração da luz polarizada.
- ✓ O aparelho utilizado para medir esse desvio é denominado ***polarímetro***.



**Representação esquemática de um polarímetro.**

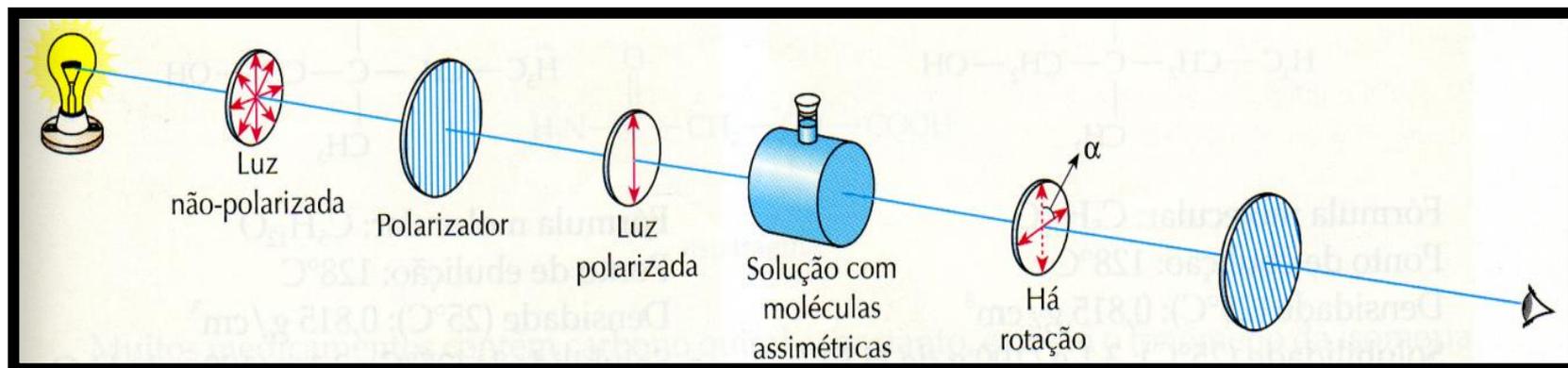
# POLARÍMETRO E DESVIO DA LUZ POLARIZADA

- ✓ Ao passar por um tubo contendo apenas moléculas simétricas, o plano de vibração da luz polarizada **não** sofre desvio (rotação).
- ✓ **Moléculas simétricas são opticamente inativas.**

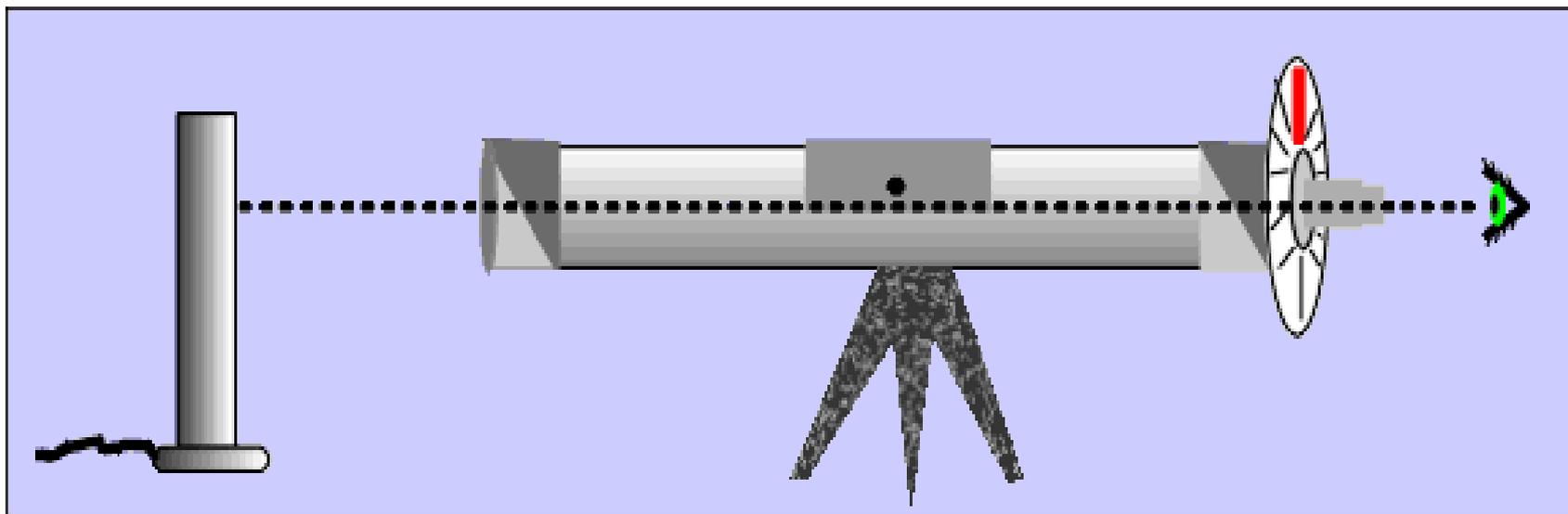


# POLARÍMETRO E DESVIO DA LUZ POLARIZADA

- ✓ Ao passar por um tubo contendo moléculas assimétricas, o plano de vibração da luz polarizada **sofre** desvio (rotação).
- ✓ **Moléculas assimétricas** são **oticamente ativas**.



# ANIMAÇÃO DO FUNCIONAMENTO DO POLARÍMETRO



Fonte: [http://www.labin.unilasalle.edu.br/infoedu/siteinfoedu1\\_03/turmasv\\_site/margo/site\\_grupo2/polarimetro.htm](http://www.labin.unilasalle.edu.br/infoedu/siteinfoedu1_03/turmasv_site/margo/site_grupo2/polarimetro.htm)

- ✓ Para uma solução contendo um composto opticamente ativo, a medida do ângulo de rotação do plano da luz polarizada, em uma dada temperatura (em geral, a **20°C**), possibilita o cálculo da concentração de tal composto, a partir da equação a seguir:

$$[\alpha]_D^t = \frac{\alpha}{d.c} \quad \text{EQ. 1}$$

- ✓ Na **equação 1**:

$[\alpha]_D^t$  = rotação específica, ou seja, é a rotação em graus observada quando se usa um tubo de 1 dm de comprimento, sendo a concentração da amostra 1 g cm<sup>-3</sup>;

$\alpha$  = ângulo (medido em graus) de rotação do plano da luz polarizada;

$l$  = é o comprimento do compartimento da amostra (em dm);

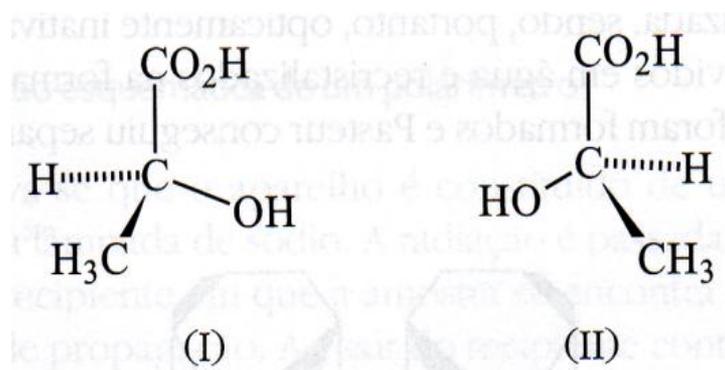
$c$  = é concentração (em g/cm<sup>3</sup>) do analito.

# POLARÍMETRO E DESVIO DA LUZ POLARIZADA

- ✓ **Dextrorrotatório** (ou dextrógiro): desvia o plano da luz polarizada no sentido horário. É indicado como **(+)**.
- ✓ **Levorrotatório** (ou levógiro): desvia o plano da luz polarizada no sentido anti-horário. É indicado como **(-)**.

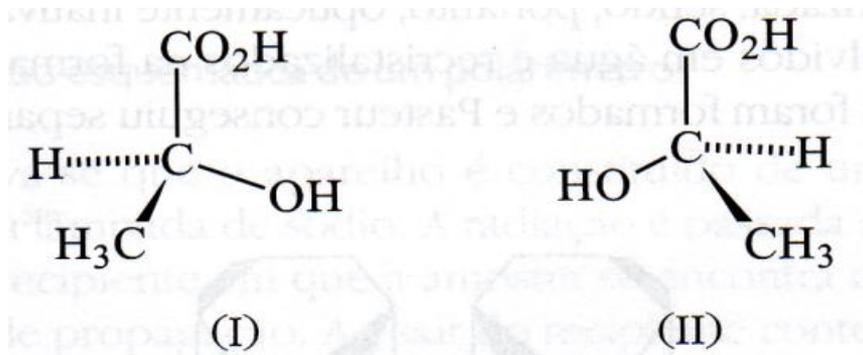
# POLARÍMETRO E DESVIO DA LUZ POLARIZADA

- ✓ As palavras dextrorrotatório e levorrotatório vêm do latim *dexter*, "direita" e *laevu*, "esquerda".
- ✓ Exemplo: ácido láctico.



- ✓ Estas moléculas parecem idênticas, mas um exame mais detalhado mostra que uma é a imagem especular da outra.
- ✓ Estas duas formas do ácido láctico são isômeros óticos e denominadas ***enantiômeros***.

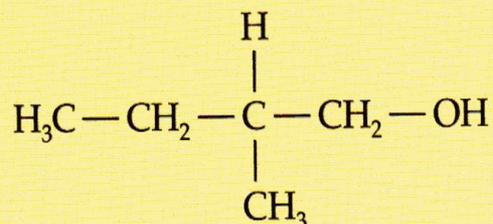
# POLARÍMETRO E DESVIO DA LUZ POLARIZADA



- ✓ O **composto (I)** desvia o plano de vibração da luz polarizada para esquerda ou no sentido anti-horário ( **$[\alpha] = -2,6^\circ$** ) e corresponde à forma do ácido láctico produzido pelos músculos e responsável pela dor causada após exercícios físicos.
- ✓ O **composto (II)**, encontrado em grande quantidade no leite azedo, desvia o plano da luz polarizada para a direita ou no sentido horário ( **$[\alpha] = +2,6^\circ$** ).

## 4. ISOMERIA ÓTICA

### (+) 2-metilbutan-1-ol



Fórmula molecular:  $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$

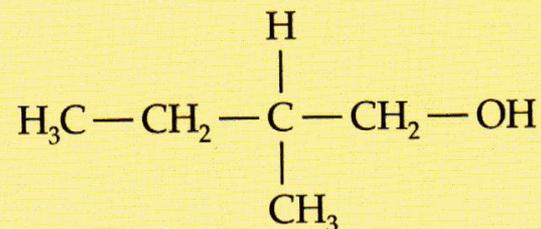
Ponto de ebulição:  $128^\circ\text{C}$

Densidade ( $25^\circ\text{C}$ ):  $0,815 \text{ g/cm}^3$

Solubilidade ( $25^\circ\text{C}$ ):  $3,1 \text{ g/100 g de H}_2\text{O}$

Desvio da luz polarizada (solução de  $1 \text{ g/cm}^3$ ; tubo de comprimento de  $10 \text{ cm}$ ):  $+5,90^\circ$  (dextrorrotatório)

### (-) 2-metilbutan-1-ol



Fórmula molecular:  $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$

Ponto de ebulição:  $128^\circ\text{C}$

Densidade ( $25^\circ\text{C}$ ):  $0,815 \text{ g/cm}^3$

Solubilidade ( $25^\circ\text{C}$ ):  $3,1 \text{ g/100 g de H}_2\text{O}$

Desvio da luz polarizada (solução de  $1 \text{ g/cm}^3$ ; tubo de comprimento de  $10 \text{ cm}$ ):  $-5,90^\circ$  (levorrotatório)

**Fonte:** PERUZZO, 2006 : p. 308.

## 4. ISOMERIA ÓTICA

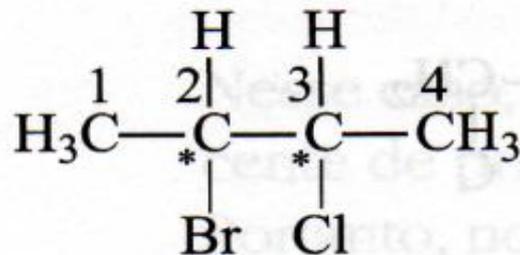
### ✓ RACEMATO:

- É uma ***mistura formada por iguais quantidades*** de uma substância levorrotatória e seu respectivo enantiômero dextrorrotatório.
- É ***oticamente inativa***, ou seja, não desvia o plano da luz polarizada.

## 4. ISOMERIA ÓTICA

### MOLÉCULAS COM MAIS DE UM CARBONO ASSIMÉTRICO

- ✓ **Exemplo 1:** 2-bromo-3-clorobutano

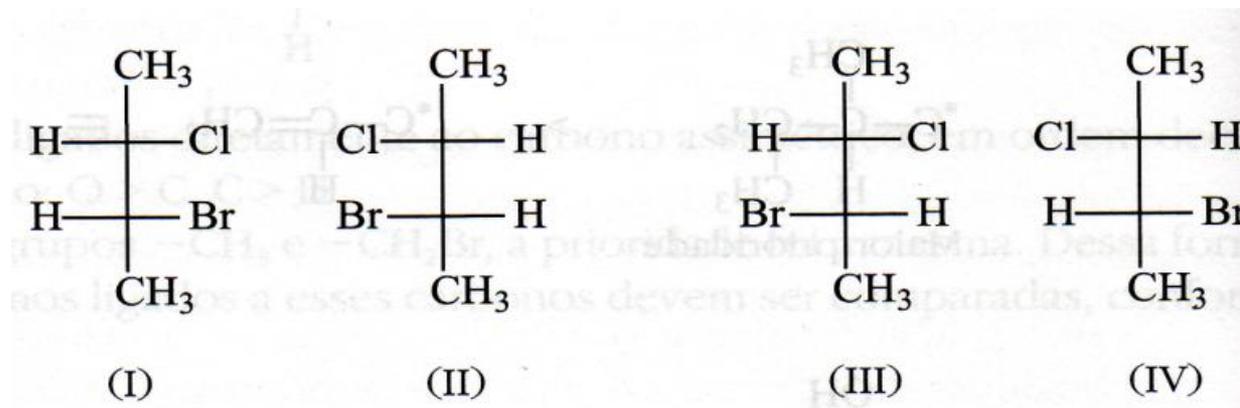


**Fonte:** BARBOSA, 2004 : p. 156.

- ✓ A moléculas acima apresenta dois carbonos (2 e 3) assimétricos (\*C).
- ✓ No caso do composto possuir  $n$  carbonos assimétricos, o número máximo de estereoisômeros que pode existir é  $2^n$ .

## 4. ISOMERIA ÓTICA

### MOLÉCULAS COM MAIS DE UM CARBONO ASSIMÉTRICO

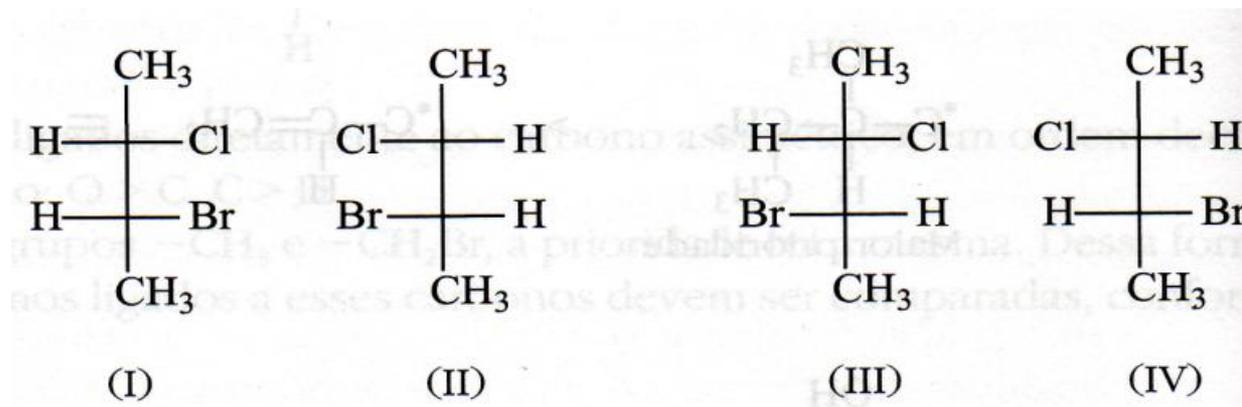


Fonte: BARBOSA, 2004 : p. 156.

- ✓ O **composto (I)** é a imagem especular do **(II)**. Eles constituem um ***par de enantiômeros***.
- ✓ Os **compostos (III)** e **(IV)** constituem ***outro par de enantiômeros***.

## 4. ISOMERIA ÓTICA

### MOLÉCULAS COM MAIS DE UM CARBONO ASSIMÉTRICO



- ✓ O **composto (I)** não é imagem especular do composto (III) nem do (IV). Similarmente, o composto (II) também não é imagem especular do (III) nem do (IV).
- ✓ Estereoisômeros que não são imagens especulares uns dos outros são chamados **diastereoisômeros**.

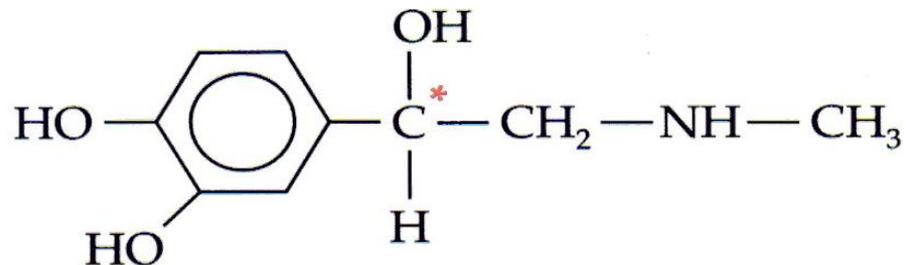
## 4. ISOMERIA ÓTICA

- ✓ Diferentemente dos enantiômeros, os **diastereoisômeros** apresentam propriedades físicas diferentes, além de diferentes rotações específicas.
- ✓ **Diastereoisômeros** são estereoisômeros que não são enantiômeros.

## 4. ISOMERIA ÓTICA

### ✓ EFEITOS FISIOLÓGICOS DOS ENANTIÔMEROS

- **Exemplo 1:** *adrenalina* (dos dois enantiômeros, apenas um deles, o levorrotatório (-) possui efeito fisiológico).

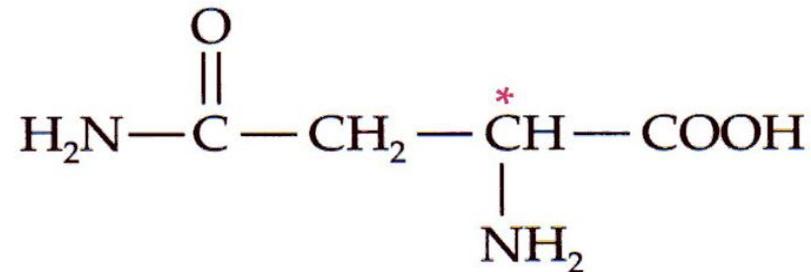


adrenalina

## 4. ISOMERIA ÓTICA

### ✓ EFEITOS FISIOLÓGICOS DOS ENANTIÔMEROS

- **Exemplo 2: *asparagina*** (cada enantiômero tem um sabor diferente).

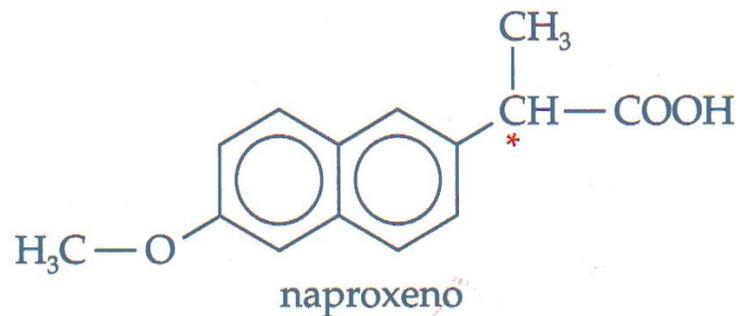


asparagina

## 4. ISOMERIA ÓTICA

### ✓ EFEITOS FISIOLÓGICOS DOS ENANTIÔMEROS

- **Exemplo:** *naxopreno* (um dos enantiômeros é comercializado como anti-inflamatório).

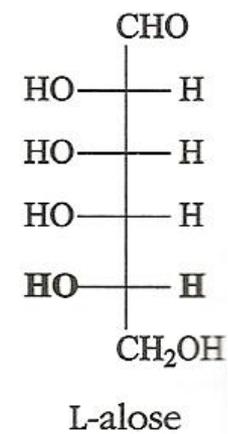
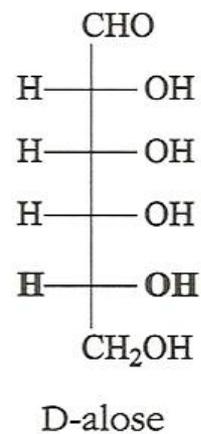
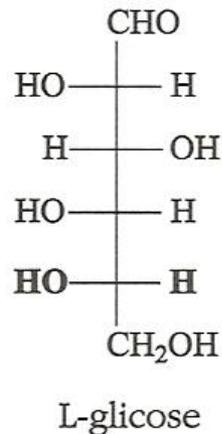
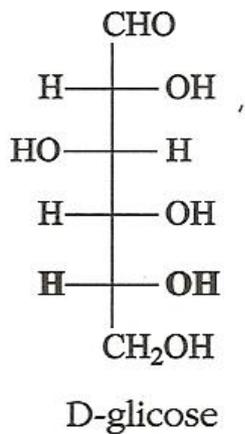


## 5. DESIGNAÇÃO D-L

- ✓ A designação D-L, conhecida como *convenção de Fischer-Rosanoff*, é usada na descrição de carboidratos e aminoácidos.
- ✓ No caso dos carboidratos, a projeção de *Fischer* é representada na vertical, com o grupo CHO no topo.
- ✓ **Carboidratos:** quando a hidroxila ligada ao carbono assimétrico mais afastado da carbonila estiver para a direita, o isômero será D, quando estiver para a esquerda será L.
- ✓  **$\alpha$ -Aminoácidos:** representa-se o grupo carboxila (-COOH) na posição superior e se o grupo  $-NH_2$ , estiver para a direita, o isômero será denominado D; se estiver para a esquerda será denominado L.

# 5. DESIGNAÇÃO D-L

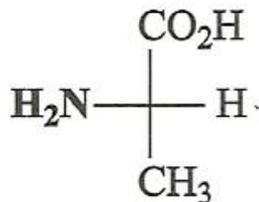
## ✓ Carboidratos:



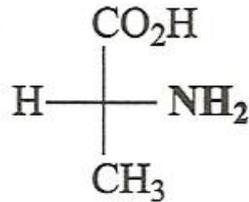
Fonte: BARBOSA, 2004 : p. 158.

## 5. DESIGNAÇÃO D-L

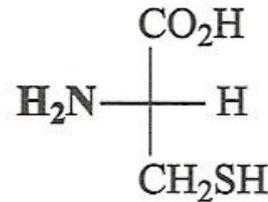
### ✓ $\alpha$ -Aminoácidos:



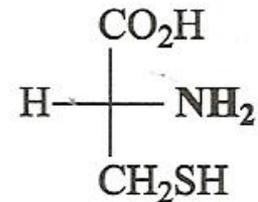
L-alanina



D-alanina



L-cisteína



D-cisteína

**Fonte:** BARBOSA, 2004 : p. 159.