

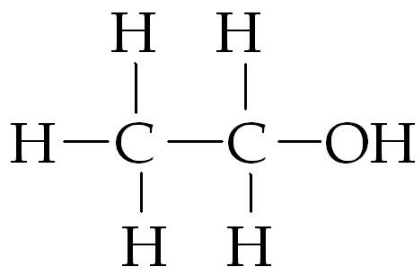
ISOMERIA

Mestranda: Daniele Potulski

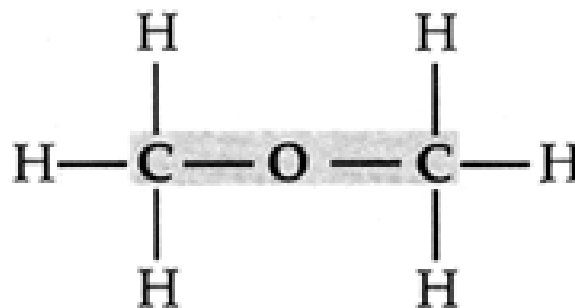
Disciplina: Química da Madeira I

Conceito

- Podem existir substâncias diferentes com a mesma fórmula molecular – fenômeno chamado **isomeria**;
- Iso: igual; meros: parte;
- Portanto, substância com a mesma fórmula molecular que apresentam propriedade químicas e físicas diferentes são chamadas de **isômeros**;



Álcool etílico (C₂H₆O)



Éter metílico (C₂H₆O)

Conceito

- O álcool etílico é líquido, ferve a 98 °C;
- O éter é um gás que se liquefaz a -24°C;
- A existência dos dois compostos ambos com a **mesma fórmula molecular** (C₂H₆O), é explicada pela **diferença na estrutura molecular**;
- Há mudança apenas na distribuição dos átomos na molécula, ou seja, no modo como elas se ligam;
- A isomeria pode ser: PLANA e ESPACIAL;

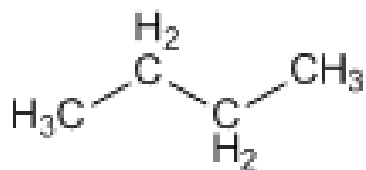
Isomeria plana

- É aquela em que os isômeros são reconhecidos, identificados e diferenciados pelas suas fórmulas estruturais planas;
- A diferenciação é visualizada através da posição de certos grupos ou insaturações, tipo de cadeia e a função;
- Assim, a isomeria se divide em:
 - Isomeria de cadeia;
 - Isomeria de posição;
 - Isomeria de função.

Isomeria plana

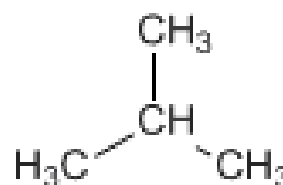
ISOMERIA DE CADEIA:

- Os compostos pertencem à mesma função e diferem no tipo de cadeia carbônica;



Butano

BUTANO - C₄H₁₀
(Hidrocarboneto de cadeia aberta e normal)



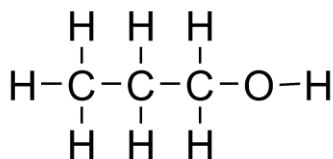
2-Metilpropano

METILPROPANO - C₄H₁₀
(Hidrocarboneto de cadeia aberta e ramificada)

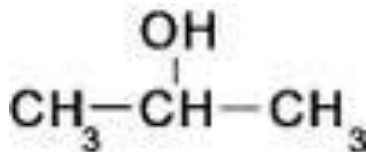
Isomeria plana

ISOMERIA DE POSIÇÃO:

- Os compostos pertencem à mesma função e diferem na posição do grupo de átomos, na posição de uma insaturação (dupla ou tripla ligação) ou na posição de uma ramificação;



1-PROPANOL - C₃H₈O
(Álcool de cadeia aberta,
saturada e normal)



2-PROPANOI - C₃H₈O
(Álcool de cadeia aberta,
saturada e normal)

Isomeria plana

ISOMERIA DE POSIÇÃO:



1-BUTENO - C₄H₈
(Hidrocarboneto de cadeia aberta, insaturada e normal)

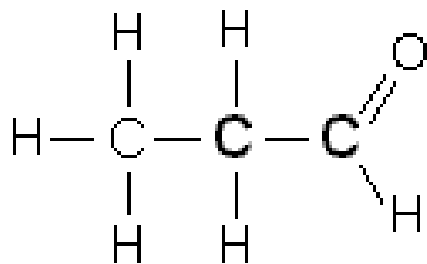


2-BUTENO - C₄H₈
(Hidrocarboneto de cadeia aberta, insaturada e normal)

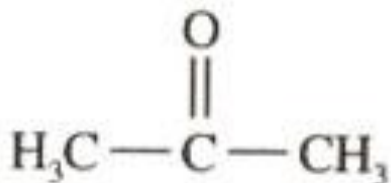
Isomeria plana

ISOMERIA DE FUNÇÃO:

- Os compostos pertencem a funções diferentes;



PROPANAL - C_3H_6O
(Aldeído de cadeia aberta,
saturada e normal)

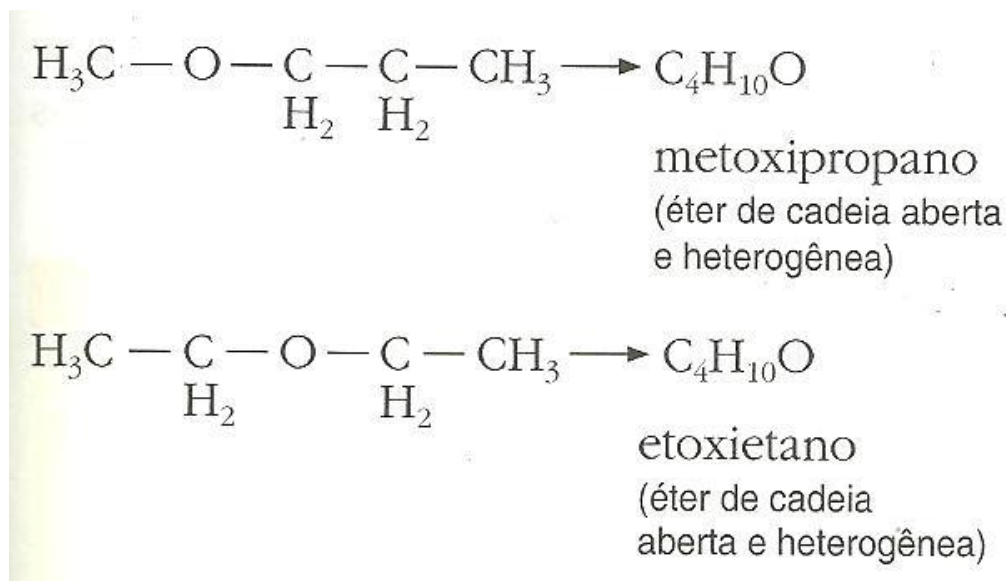


PROPANONA - C_3H_6O
(Aldeído de cadeia aberta,
saturada e normal))

- Os casos principais de isomeria funcional ocorrem entre as funções aldeído – cetona, álcool – éter e ácido carboxílico – éster;

Metameria

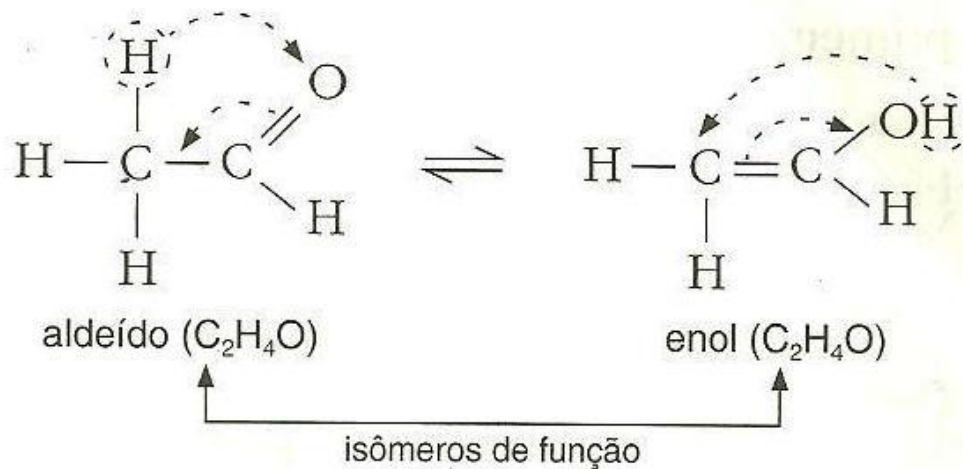
- É um tipo especial de isomeria plana em que os compostos diferem quanto a posição de um heteroátomo, é também conhecida como **isomeria de compensação**;



- A diferença entre os compostos está na posição do heteroátomo oxigênio.

Tautomeria

- Outro tipo especial de isomeria plana;
- Nesse caso os compostos de diferem quanto à função;



- Parte do aldeído de se converte em enol, através da migração de um átomo de hidrogênio na molécula, estabelecendo um equilíbrio dinâmico entre aldeído e enol, chamado **equilíbrio aldolenólico**.

Tautomeria

- **Tautômeros**: isômeros nessa condição;
- O fenômeno de conversão de um tautômero em outro recebe o nome de **tautomerização**;
- Ocorre com outros compostos, como cetonas;

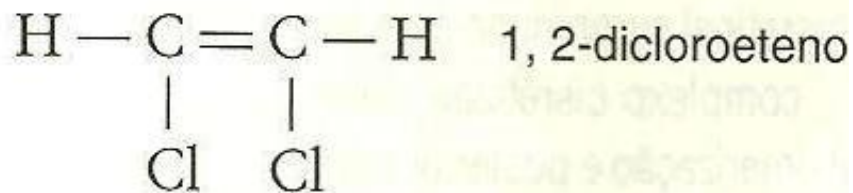
Isomeria espacial

- É aquela em que os isômeros possuem a mesma fórmula estrutural plana;
- São reconhecidos, identificados e diferenciados por suas fórmulas estruturais espaciais;
- A isomeria espacial divide-se em:
 - Isomeria geométrica;
 - Isomeria óptica;

Isomeria espacial

ISOMERIA GEOMÉTRICA OU CIS – TRANS

- Os átomos podem dispor-se no espaço de duas maneiras diferentes sem mudar as ligações entre si;
- Fórmula estrutural plana 1,2-dicloroeteno:

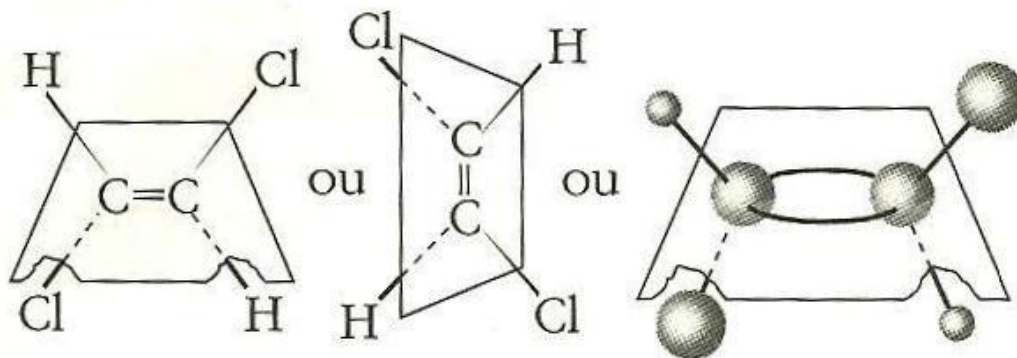


- Em cada carbono ligam-se um hidrogênio e um cloro;

Isomeria espacial

ISOMERIA GEOMÉTRICA OU CIS – TRANS

- Primeira fórmula:



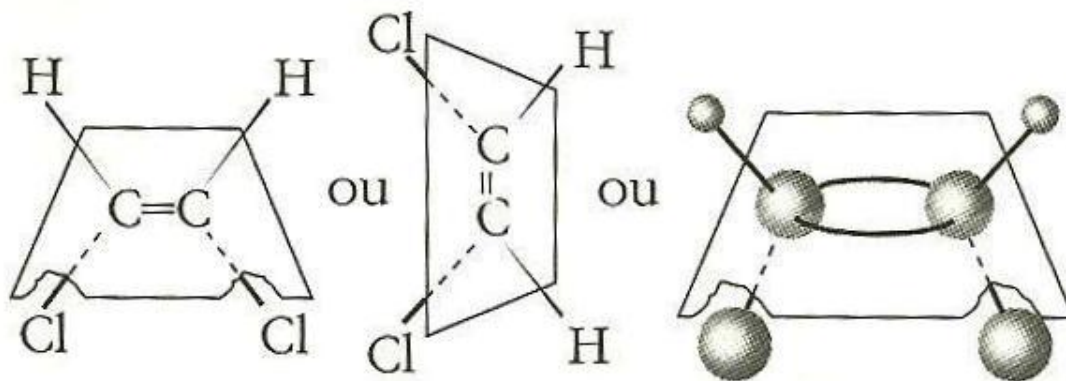
- Em relação ao plano que contém os dois carbonos da dupla, os hidrogênios e os cloros estão em lados opostos.

Composto TRANS = do outro lado → trans-1,2-dicloroeteno

Isomeria espacial

ISOMERIA GEOMÉTRICA OU CIS – TRANS

- Segunda fórmula:



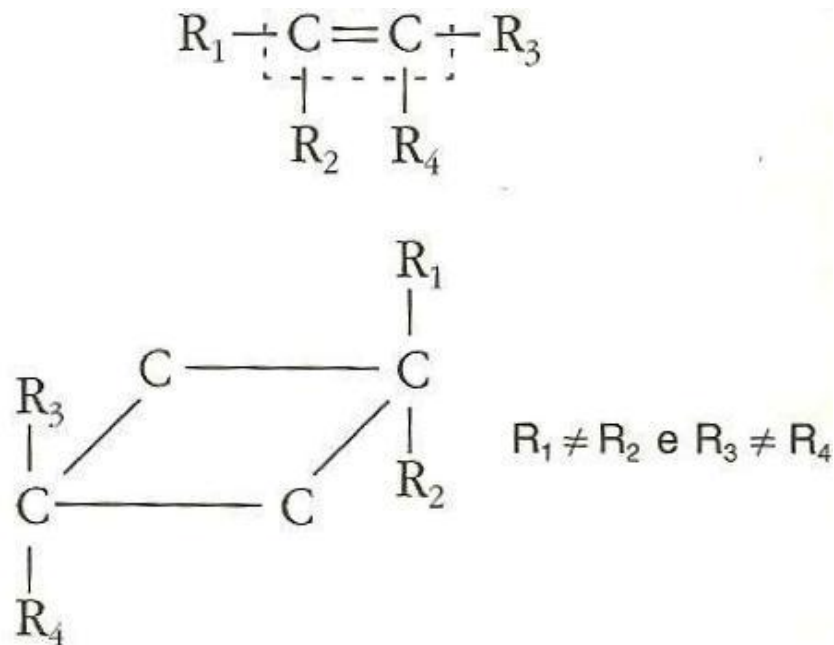
- Em relação ao plano que contém os dois carbonos da dupla, os hidrogênios e os cloros estão do mesmo lado.

Composto CIS = deste lado → cis-1,2-dicloroeteno

Isomeria espacial

ISOMERIA GEOMÉTRICA OU CIS – TRANS

- Isômeros geométricos:



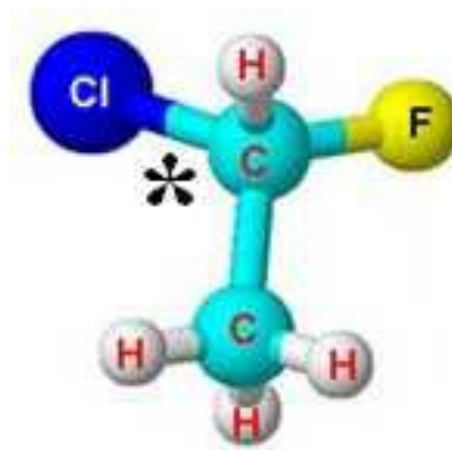
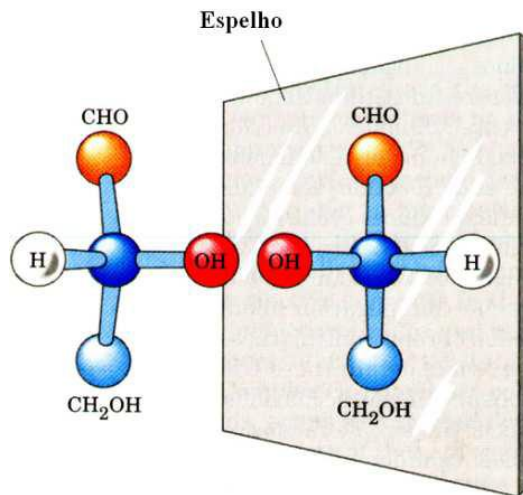
- Os dois radicais R mais simples do mesmo lado definem o isômero cis;
- Os dois radicais R mais simples em lados opostos definem o isômero trans;

Isomeria óptica

- A isomeria óptica é um caso particular da isomeria espacial que só ocorre em **moléculas quirais**.
- O termo **quiral** se refere a ausência de simetria (**assimétrico**).
- Um objeto quiral não é idêntico a sua imagem especular, a imagem e o objeto não são superponíveis.
- Existem vários exemplos de objetos e de organismos quirais em nosso cotidiano e na natureza.
- Dois exemplos comuns são: cristais quirais e as mãos.

Isomeria óptica

- Uma molécula quiral não é idêntica a sua imagem no espelho.
- As moléculas quirais não possuem plano de simetria.

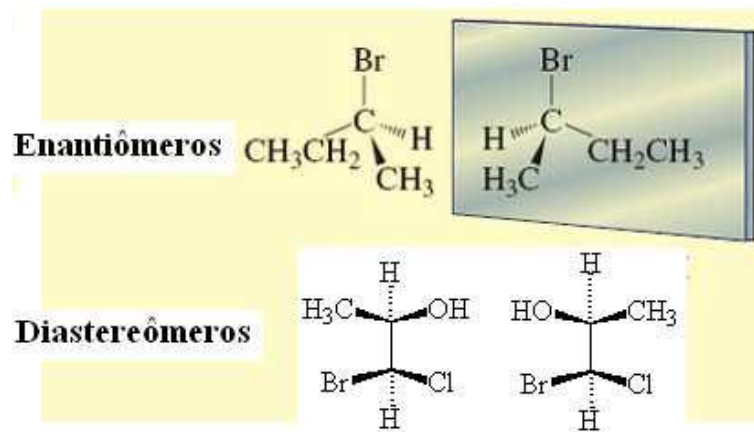


Carbono assimétrico é um carbono que está ligado a **quatro grupos diferentes**.

- Para ocorrer a quiralidade em uma molécula ela deve ter um ou mais carbonos assimétricos ou possuir assimetria molecular devido a algum fator estrutural.
- O carbono assimétrico também pode ser denominado de **quiral**, **estereocentro** ou **estereogênio**.

Isômeros ópticas

- Existem duas classes de isômeros ópticos:
 - Enantiômeros**: estereoisômeros que são imagens especulares um do outro, que não se superpõem.
 - Diastereômeros**: estereoisômeros que não são imagens especulares um do outro e que não se superpõem.

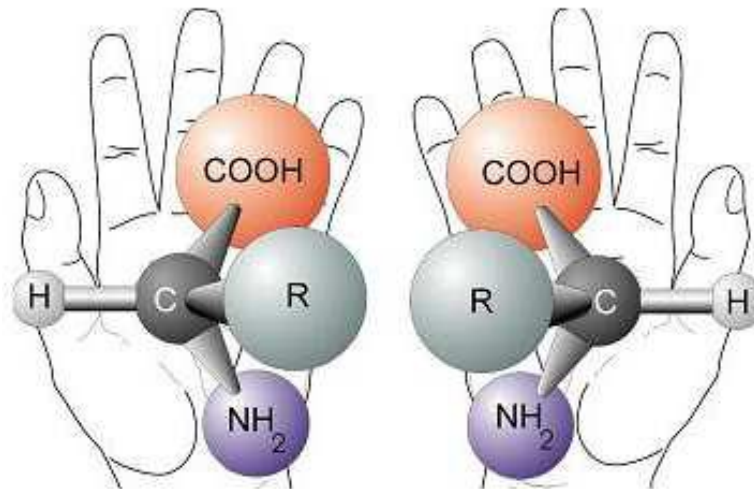


- O termo enantiômeros às vezes é substituído por antípodas ópticas ou enantiomorfos e diastereômeros por diastereoisômeros.

Isômeros ópticas

ENANTIÔMEROS

- Somente moléculas quirais podem apresentar enantiômeros.

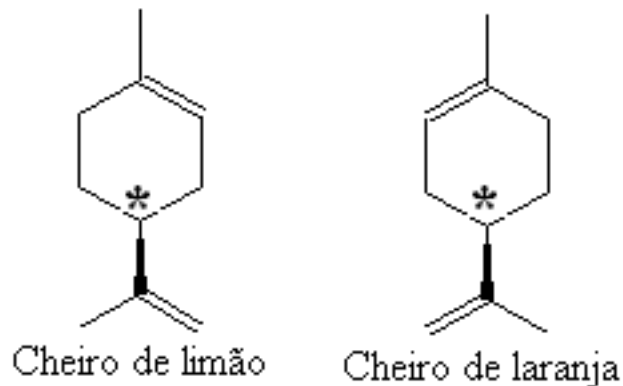


- Os enantiômeros possuem propriedades físicas (PE, PF, densidade, índice de refração etc.) idênticas.
- Por isso uma mistura de enantiômeros é muito difícil de ser separada. A separação (resolução) pode ser feita por métodos químicos ou biológicos.

Isômeros ópticas

ENANTIÔMEROS

- Apesar de muito parecidos os enantiômeros podem apresentar várias propriedades, como cheiro, sabor, propriedades biológicas e químicas, completamente diferentes.

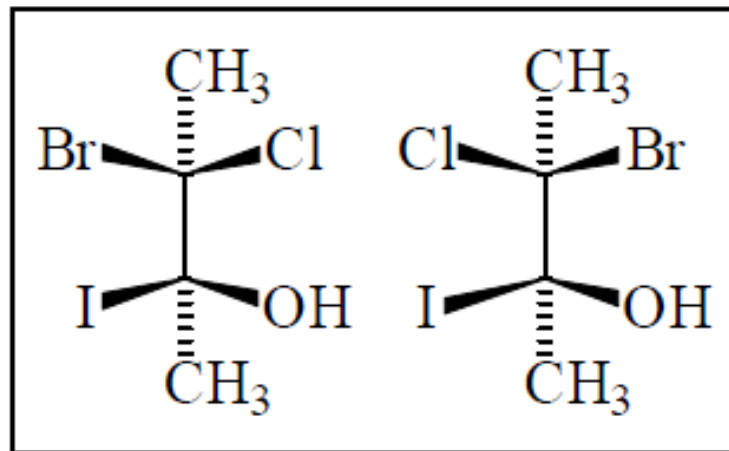


- Os enantiômeros só exibem comportamento diferente quando interagem com outras substâncias quirais ou com a luz polarizada.

Isômeros ópticas

DIASTEREÔMEROS

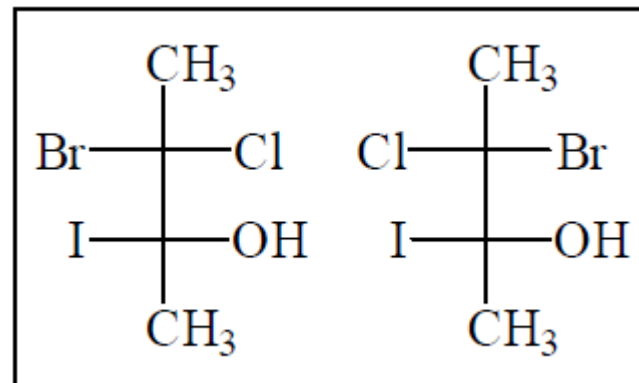
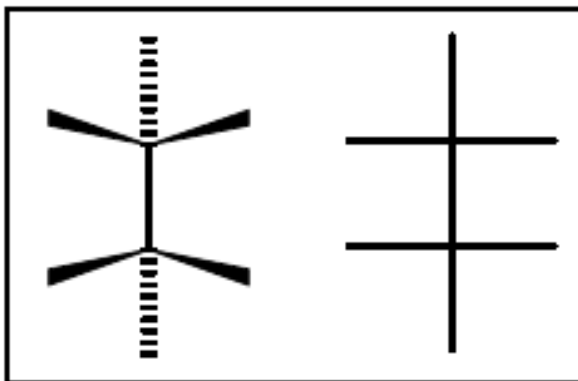
- Possuem propriedades físicas e químicas diferentes, portanto podem ser facilmente separados por métodos físicos tradicionais.



Isômeros ópticas

DIASTEREÔMEROS

- Para facilitar a representação dos isômeros ópticos utiliza-se as projeções de Fischer.
- Nas projeções de Fischer linhas verticais representam ligações que são projetadas para trás do plano do papel e linhas horizontais representam ligações que são projetadas para fora do papel.

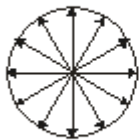


Isômeros ópticas

LUZ POLARIZADA

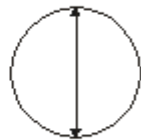
- A luz natural é uma onda eletromagnética que possui infinitos planos de vibração, e a luz polarizada possui um único plano de vibração.

luz natural

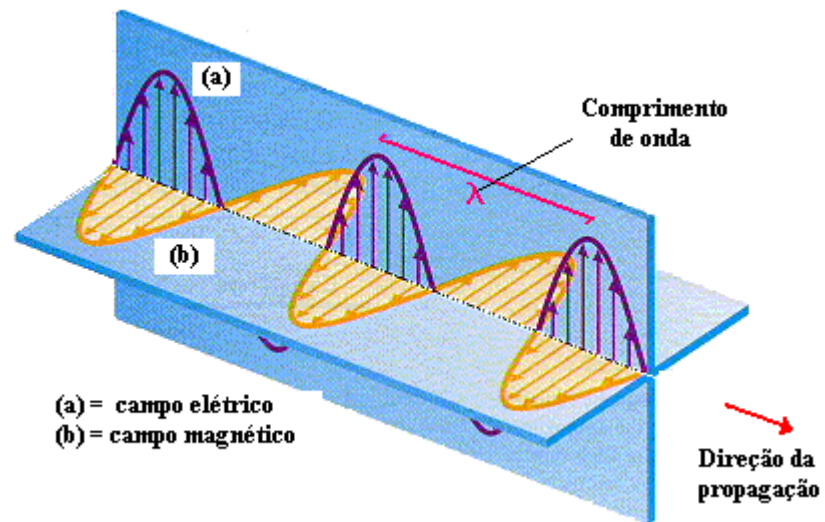


muitos planos de vibração

luz polarizada



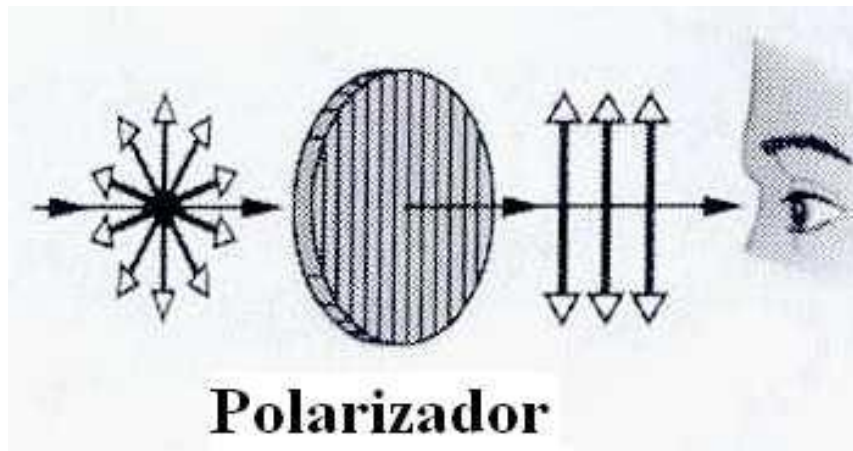
único plano de vibração



Isômeros ópticas

LUZ POLARIZADA

- A luz pode ser polarizada por várias substâncias, tanto naturais quanto sintéticas, que são denominadas **polarizadores**.



Isômeros ópticas

LUZ POLARIZADA

- Uma das principais características de uma molécula quiral é a capacidade de desviar o plano de propagação da luz polarizada.
- Substâncias com essa característica são opticamente ativas.

Substâncias Opticamente Ativas (SOA) = São as substâncias que desviam o plano de propagação da luz polarizada (quirais). Possuem carbono assimétrico ou assimetria molecular.

Substâncias Opticamente Inativas (SOI) = São as que não desviam o plano de vibração de luz polarizada (aquirais).

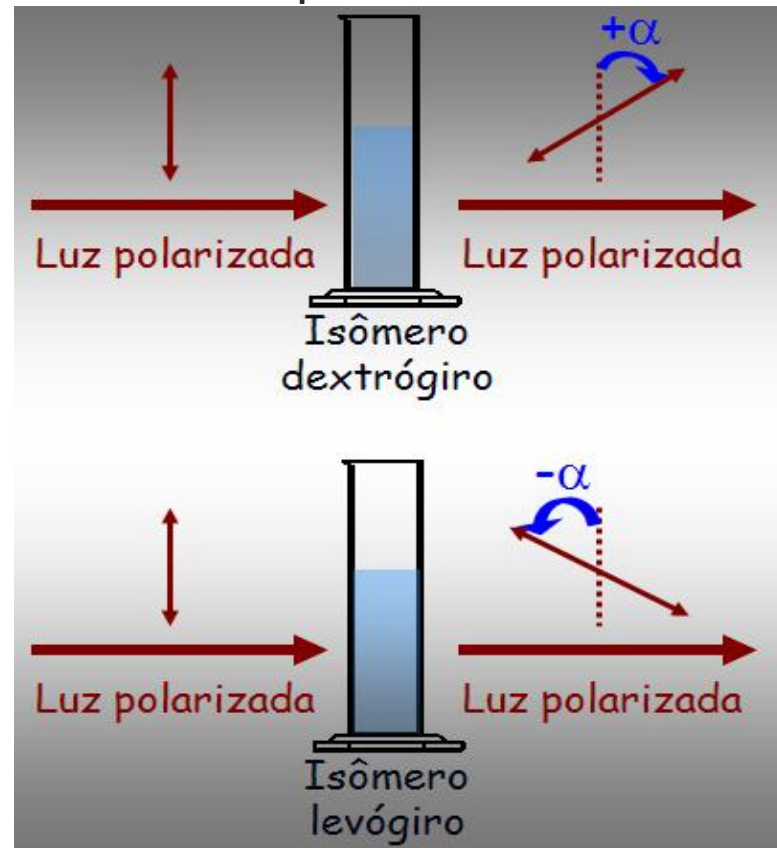
Isômeros ópticas

LUZ POLARIZADA

- Os enantiômeros desviam o plano da luz polarizada com o mesmo desvio angular, mas em sentidos opostos:

O isômero que produz o desvio para a direita é denominado de dextrógiro (d ou +);

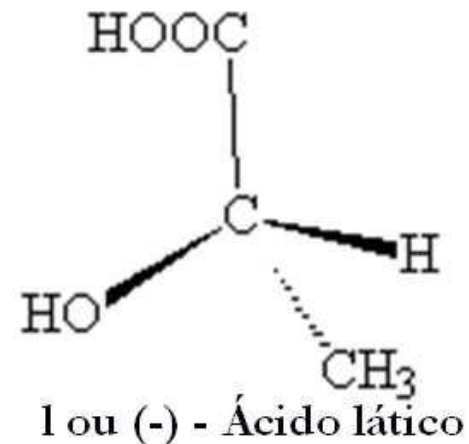
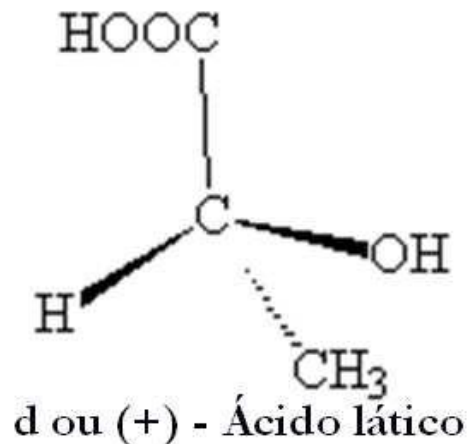
E o isômero que provoca o desvio para a esquerda, é denominado de levógiro (l ou -).



Isômeros ópticas

LUZ POLARIZADA

- A mistura equimolar de um par de enantiômeros (50% dextrogiro + 50% levogiro) é denominada de mistura racêmica ou racemato.
- Uma mistura racêmica é opticamente inativa por compensação externa.



Isômeros ópticas

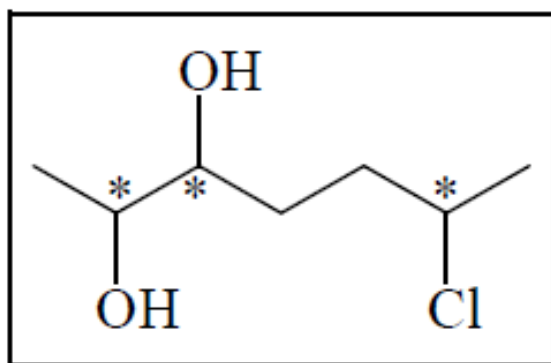
CÁLCULO DO NÚMERO DE ISÔMEROS ÓPTICOS E RÂCEMICOS

n = Número de carbonos assimétricos

2^n = Número de isômeros opticamente ativos (IOA)

2^{n-1} = Número de racêmicos e número de pares de enantiômeros

- Exemplo:



**Carbonos assimétricos*

$$n = 3$$

$$2^3 = 8 \text{ (IOA)}$$

$$2^{3-1} = 4 \text{ racêmicos}$$

$$\text{Pares de enantiômeros} = 4$$

Isômeros ópticas

CÁLCULO DO NÚMERO DE ISÔMEROS ÓPTICOS E RÂCEMICOS

- Substâncias com carbonos assimétricos com ligantes iguais:
 - Nesse caso o composto irá apresentar um estereoisômero inativo denominado de **meso**.
 - O isômero meso é um caso particular no qual a molécula possui carbonos assimétricos e plano de simetria (**aquiral**).

Composto meso = composto opticamente inativo cuja molécula é aquiral mesmo quando contém átomos tetraédricos ligados a quatro grupos diferentes (carbonos assimétricos).

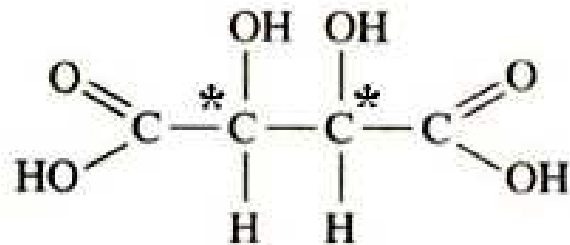
- O **isômero meso** só existe em moléculas que possuem **números pares de carbonos assimétricos**.

Isômeros ópticas

CÁLCULO DO NÚMERO DE ISÔMEROS ÓPTICOS E RÂCEMICOS

- Substâncias com carbonos assimétricos com ligantes iguais:
- Exemplo:

O ácido tartárico é o principal exemplo de composto orgânico que possui isômero meso.

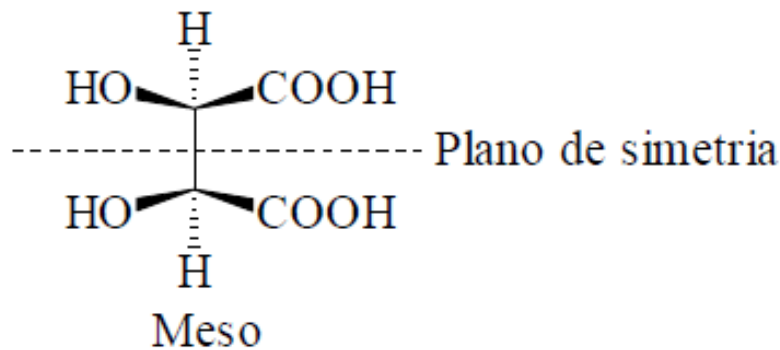
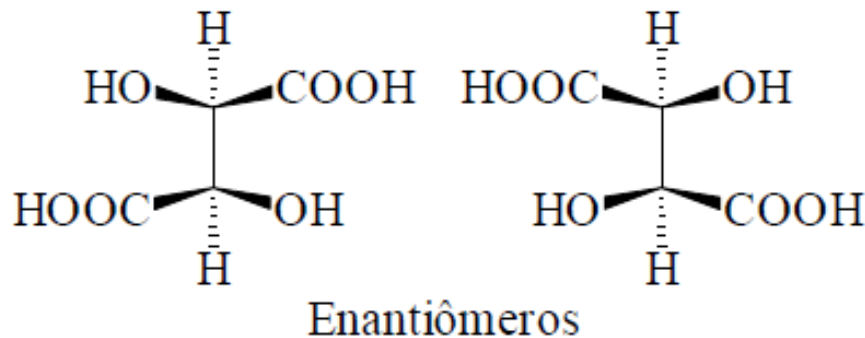


- Em compostos como o ácido tartárico com dois carbonos quirais com ligantes iguais, o número máximo de estereoisômeros é três: um par de enantiômeros e um composto meso.

Isômeros ópticas

CÁLCULO DO NÚMERO DE ISÔMEROS ÓPTICOS E RÂCEMICOS

- Substâncias com carbonos assimétricos com ligantes iguais:
- Exemplo:



Como só temos **um par de enantiômeros** só é possível a existência de **uma mistura racêmica**.

Obrigada pela atenção!!