

ALEXANDRE J. S. GÓES

ESTEREOISOMERIA DE COMPOSTOS ORGÂNICOS

Conceitos e aplicações



Blucher

Alexandre J. S. Góes

ESTEREOISOMERIA DE
COMPOSTOS ORGÂNICOS
CONCEITOS E APLICAÇÕES

Estereoisomeria de compostos orgânicos: conceitos e aplicações

© 2019 Alexandre J. S. Góes

Editora Edgard Blücher Ltda.

Imagem da capa: iStockphoto

Blucher

Rua Pedroso Alvarenga, 1245, 4º andar

04531-934 – São Paulo – SP – Brasil

Tel.: 55 11 3078-5366

contato@blucher.com.br

www.blucher.com.br

Segundo Novo Acordo Ortográfico, conforme
5. ed. do *Vocabulário Ortográfico da Língua
Portuguesa*, Academia Brasileira de Letras,
março de 2009.

É proibida a reprodução total ou parcial por
quaisquer meios sem autorização escrita da
editora.

Todos os direitos reservados pela Editora
Edgard Blücher Ltda.

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Angélica Ilacqua CRB-8/7057

Góes, Alexandre J. S.

Estereoisomeria de compostos orgânicos : conceitos
e aplicações / Alexandre J. S. Góes. – São Paulo : Blucher,
2019.

256 p. : il.

Bibliografia

ISBN 978-85-212-1432-8 (impresso)

ISBN 978-85-212-1433-5 (e-book)

1. Estereoquímica 2. Química orgânica 3. Compostos
orgânicos I. Título.

19-0208

CDD 547

Índice para catálogo sistemático:
1. Química orgânica : Estereoquímica

CONTEÚDO

1. REPRESENTAÇÃO DE FÓRMULAS ESTRUTURAIS PLANAS	15
1.1 Fórmulas de Lewis	15
1.2 Fórmulas de traços.....	16
1.3 Fórmulas condensadas	17
1.4 Fórmulas de linha-ângulo (zigzague)	17
1.5 Informação sobre nomenclatura	18
2. FORMAS GEOMÉTRICAS E REPRESENTAÇÕES DE MOLÉCULAS NO ESPAÇO	21
2.1 Ângulos de torção (ω) e ângulos de valência (θ)	21
2.2 Formas geométricas das moléculas orgânicas.....	22
2.3 Convenções (representações) de uma molécula	25
2.4 Passagem de uma representação para outra.....	39
3. ISOMERIA	45
3.1 Isomeria constitucional.....	45
4. ESTEREOISÔMEROS.....	51
4.1 Configuração e conformação	52
4.2 Estereoisômeros configuracionais	53

5. ENANTIOMERIA.....	55
5.1 Propriedades de enantiômeros	59
5.2 Rotação específica $[\alpha]$	63
5.3 Excesso enantiomérico (ee)	64
5.4 Molécula quiral	66
5.5 Elementos de simetria	69
5.6 Descritores <i>R/S</i>	79
5.7 Superposição de uma molécula e sua imagem em projeção de Fischer	102
5.8 A importância do conhecimento da configuração absoluta	106
5.9 Descritores <i>r/s</i> (pseudorectus <i>r</i> /pseudosinister <i>s</i>).....	116
6. PROQUIRALIDADE.....	123
6.1 Centro proquiral.....	123
6.2 Descritores pro-rectus (<i>pro-R</i>) e pro-sinister (<i>pro-S</i>)	123
6.3 Determinação das faces de um átomo trigonal sp^2 (faces <i>si</i> e <i>re</i>).....	129
6.4 Aplicação completa de <i>pro-R</i> , <i>pro-S</i> , face <i>re</i> , face <i>si</i> e configuração <i>R/S</i> ...	132
7. CLASSIFICAÇÃO DE COMPOSTOS EM SÉRIES <i>D/L</i>.....	135
7.1 Descritores <i>D/L</i> (convenção de Fischer-Rosanoff)	135
7.2 Correspondência da configuração <i>D/L</i> com a configuração absoluta <i>R/S</i>	136
7.3 Aminoácidos: Série <i>D</i> e <i>L</i>	140
8. DIASTEREOISOMERIA.....	145
8.1 Diastereoisomeria <i>cis</i> e <i>trans</i> de alquenos	150
8.2 Diastereoisomeria <i>Z</i> e <i>E</i>	153
8.3 Diastereoisomeria <i>cis</i> e <i>trans</i> de compostos cíclicos	156
8.4 Diastereoisomeria <i>eritro</i> e <i>treo</i>	157
8.5 Diastereoisomeria de sistemas bicíclicos com pontes (descritores <i>endo</i> , <i>exo</i> , <i>sin</i> e <i>anti</i>).....	161
8.6 Diastereoisomeria de dois ou mais ciclos colados.....	166

9. CARBOIDRATOS: REPRESENTAÇÕES E NOMENCLATURAS DO CARBONO ANOMÉRICO	171
9.1 Representações cíclicas de Fischer (forma linear) e nomenclatura α , β	171
9.2 Passagem da forma de Fischer (forma linear) para forma cíclica de Haworth de cinco átomos (furanoses) e seis átomos (piranoses)	175
9.3 Representação em perspectiva plana de Haworth	183
9.4 Representação de Haworth: Série <i>D</i> e Série <i>L</i> ; Anômero β e Anômero α	184
9.5 Imagem no espelho de β - <i>D</i> e β - <i>L</i> -glicopiranosose e α - <i>D</i> e α - <i>L</i> -glicopiranosose	185
9.6 Avaliação da configuração relativa de carboidratos na projeção de Fischer ...	187
9.7 Determinação da série <i>D</i> ou <i>L</i> em estruturas cíclicas.....	190
9.8 Classificação das nomenclaturas α - <i>D</i> , β - <i>D</i> , α - <i>L</i> e β - <i>L</i> na fórmula de Haworth	193
10. NOMENCLATURA DAS CONFORMAÇÕES DE KLYNE E PRELOG	197
10.1 Terminologia: sin-periplanar, anti-periplanar, sinclinal e anticlinal.....	197
11. RELAÇÃO ENTRE GRUPOS DE UMA MOLÉCULA	201
11.1 Topicidade.....	201
11.2 Grupos homotópicos (equivalentes).....	201
11.3 Grupos enantiotópicos	205
11.4 Análise envolvendo hidrogênios homotópicos e enântiotópicos	208
11.5 Grupos diastereotópicos.....	211
11.6 Exemplos de hidrogênios geminais e metilas geminais homotópicos, enantiotópicos e diastereotópicos	214
12. FACES HOMOTÓPICAS, FACES ENANTIOTÓPICAS E FACES DIASTEREOTÓPICAS.....	217
12.1 Faces homotópicas	217
12.2 Faces enantiotópicas.....	218
12.3 Faces diastereotópicas.....	219
12.4 Faces diastereotópicas mostradas em Newman.....	220

12.5 Modelo de Cram (1952).....	221
12.6 Modelo quelado de Cram (1959).....	222
12.7 Modelo de Cornoforth (1959).....	222
12.8 Modelo de Karabatsos (1967).....	223
12.9 Modelo de Felkin (1968).....	223
12.10 Modelo de Felkin e Anh (1977).....	223
13. ESTEREOISOMERIA DE DIENOS ACUMULADOS, SISTEMAS ESPIRANOS, SISTEMAS ALQUILIDENO-CICLOALCANOS E SISTEMAS BIFENILAS.....	227
13.1 Dienos acumulados.....	228
13.2 Sistemas espiranos.....	229
13.3 Sistemas alquilideno-cicloalcanos.....	230
13.4 Sistemas bifenilas.....	231
14. PLANO DE QUIRALIDADE (CONFIGURAÇÃO ABSOLUTA <i>pR</i> E <i>pS</i>)... 	233
14.1 Descritores <i>pR</i> e <i>pS</i>	233
15. SISTEMAS <i>SIN</i>, <i>ANTI</i>, <i>LIKE</i> E <i>UNLIKE</i>	237
15.1 Sistemas <i>sin</i> e <i>anti</i> de Masamune.....	237
15.2 Sistemas <i>like</i> e <i>unlike</i>	239
16. MÉTODO DE SEPARAÇÃO DE RACEMATOS POR FORMAÇÃO DE DIASTEREISÔMEROS.....	241
16.1 Exemplos de resolução de racematos.....	243
RESPOSTAS DOS EXERCÍCIOS	245
REFERÊNCIAS	253

CAPÍTULO 1

REPRESENTAÇÃO DE FÓRMULAS ESTRUTURAIS PLANAS

É importante, antes de começar os capítulos de isomeria, revisar as principais fórmulas estruturais planas que são utilizadas na química orgânica. São elas:

Fórmulas de Lewis (pontos que representam elétrons de valência).

Fórmulas de traços (os traços representam os elétrons de valência formando as ligações).

Fórmulas condensadas (mostram todos os carbonos e hidrogênios e omitem as ligações covalentes).

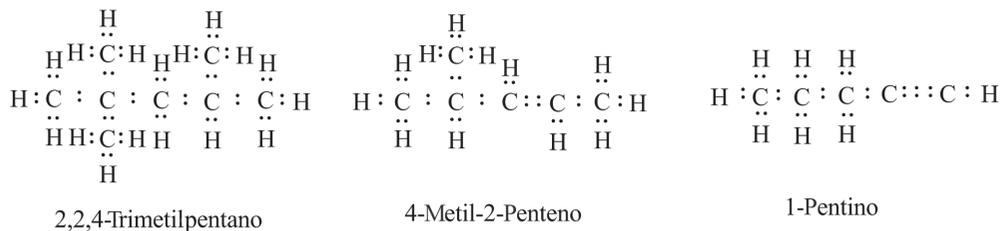
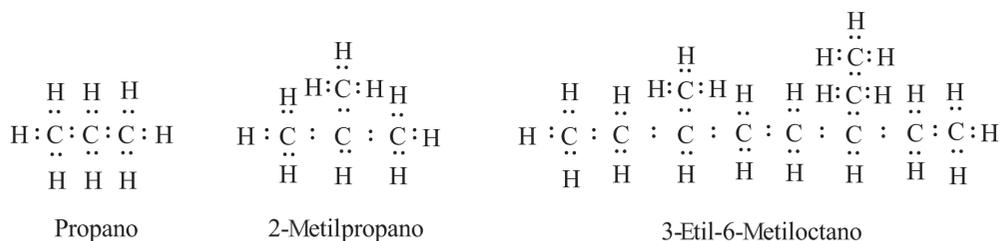
Fórmulas de linha-ângulo (zigzag) (os átomos de carbono e hidrogênio não são mostrados. A linha indica a ligação entre carbonos).

A seguir, as principais fórmulas estruturais planas:

1.1 FÓRMULAS DE LEWIS

Na estrutura de Lewis, cada elétron de valência é representado por um ponto. As ligações químicas covalentes são representadas por pares de elétrons. Então, por exemplo, entre dois átomos de carbono, uma ligação simples corresponde a um par de elétrons compartilhado (C:C); uma ligação dupla corresponde a dois pares de elétrons (C::C) e uma ligação tripla corresponde a três pares de elétrons compartilhados (C:::C).

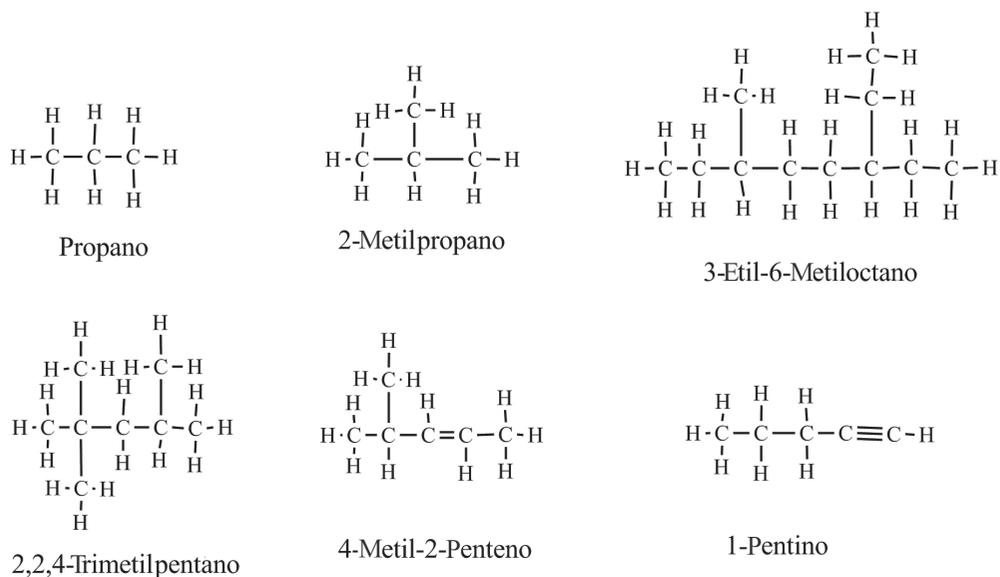
Exemplos de alguns hidrocarbonetos



1.2 FÓRMULAS DE TRAÇOS

Nas fórmulas de traços, um par de elétrons compartilhado (C:C) na estrutura de Lewis é representado por um traço (C-C), uma ligação dupla (C::C) de Lewis é representada por dois traços (C=C) e uma ligação tripla (C:::C) é representada por três traços (C≡C).

Exemplos



1.3 FÓRMULAS CONDENSADAS

Correspondem a uma simplificação estrutural. Mostram todos os carbonos, hidrogênios e outros átomos e omitem as ligações covalentes de traços ou de pontos.

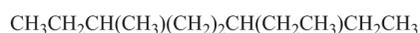
Exemplos



Propano



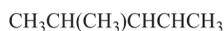
2-Metilpropano



3-Etil-6-Metiloctano



2,2,4-Trimetilpentano



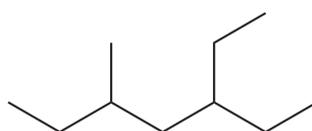
4-Metil-2-Penteno



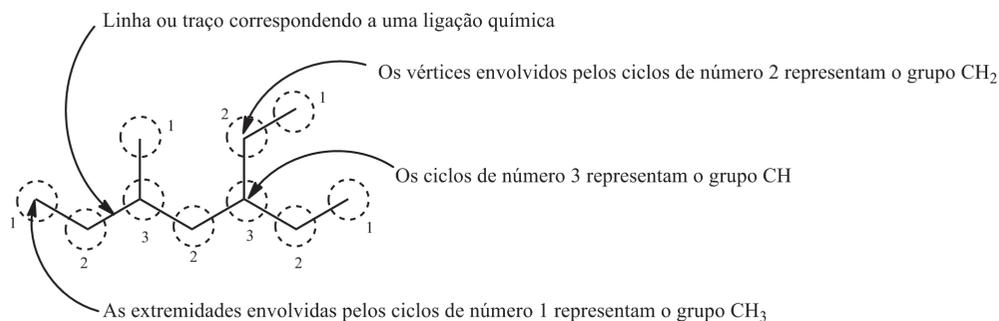
1-Pentino

1.4 FÓRMULAS DE LINHA-ÂNGULO (ZIGUEZAGUE)

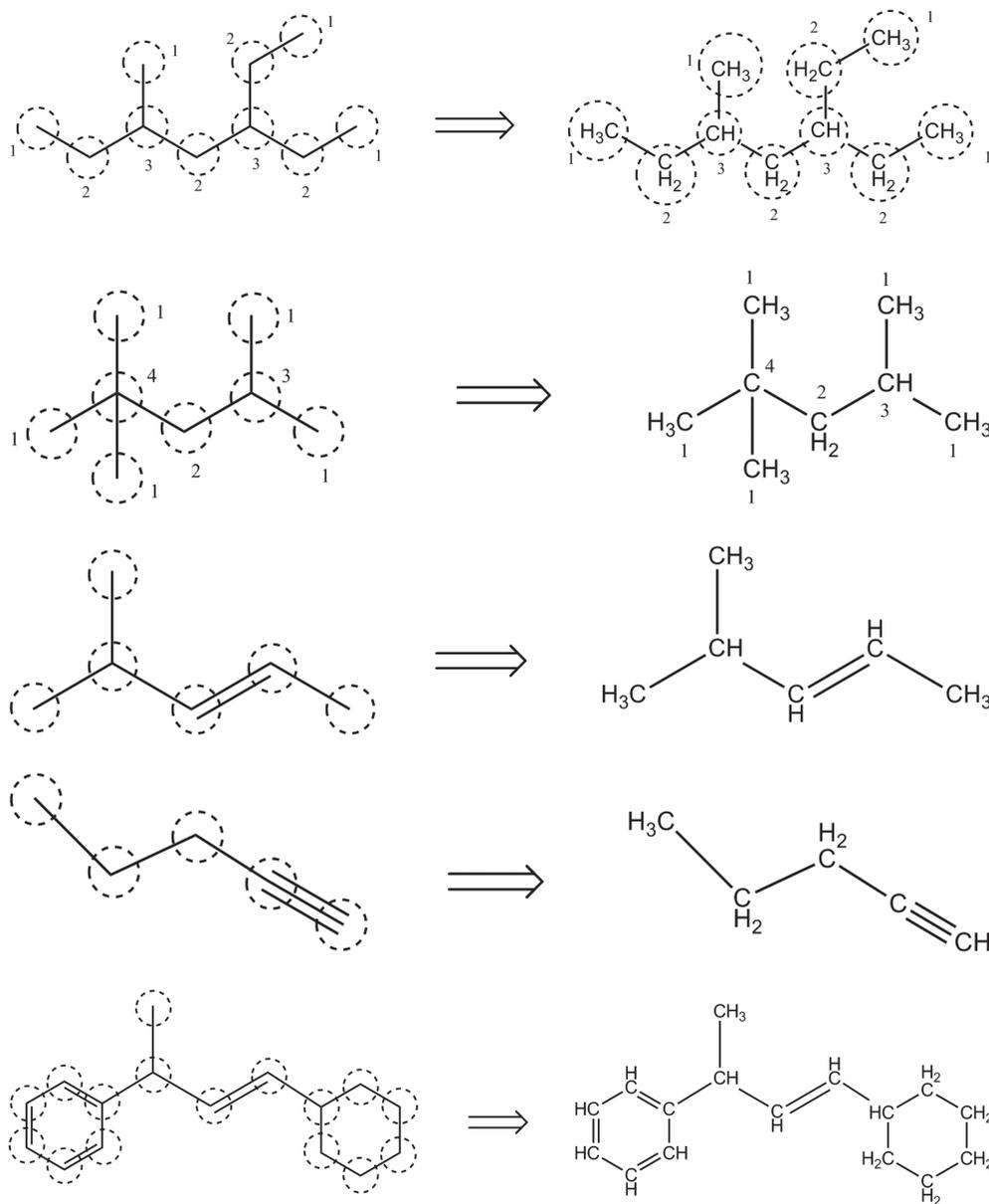
As fórmulas de linha-ângulo são representações mais fáceis e rápidas de serem desenhadas, em comparação com outras fórmulas. Esse tipo de fórmula não mostra os carbonos nem os hidrogênios, apenas as ligações covalentes na forma de linha ou traço entre os carbonos, que são representados pelos vértices. Sabendo que o carbono forma quatro ligações covalentes, fica fácil a dedução, contando com as linhas já existentes na fórmula, da quantidade de hidrogênios que fazem parte, mas são omitidos na estrutura. Observe no exemplo a seguir que, nas extremidades envolvidas pelo ciclo de número 1, é mostrado apenas um traço (uma ligação), subentendendo-se que nesses carbonos há três hidrogênios. Os vértices envolvidos pelo ciclo de número 2 apresentam dois traços (duas ligações). Dessa forma, fica subentendido que naqueles carbonos há dois hidrogênios e, nos vértices envolvidos pelo ciclo de número 3, há três traços (três ligações), portanto, apenas um hidrogênio.



3-Etil-5-Metileptano



Exemplos da substituição dos ciclos por CH₃, CH₂ e CH



1.5 INFORMAÇÃO SOBRE NOMENCLATURA

Existe um conjunto de regras estabelecidas pela IUPAC (do inglês, International Union of Pure and Applied Chemistry e, em português, União Internacional de Química Pura e Aplicada) que são as mais utilizadas. Outra fonte para nomear uma substância é a CA (Chemical Abstracts). Sua formação obedece a regras particulares que são

frequentemente parecidas com as da IUPAC. Encontra-se ainda outra denominação, a INN (International Nonproprietary Name), geralmente utilizada para medicamentos, inserida para designar de forma simples e sem ambiguidade as substâncias farmacêuticas. Em caso de dúvida ou para se aprofundar mais sobre os nomes sistemáticos de compostos químicos, o estudante pode consultar as regras editadas pela IUPAC.

A estereoquímica é um ramo da química que estuda os aspectos tridimensionais das moléculas e suas aplicações. Devido à complexidade do assunto, poucas são as opções de livros-texto nacionais.

Visando preencher essa lacuna, esta obra traz uma abordagem única, concisa, inédita na forma de apresentação, e, principalmente, em sua didática, sendo estes seus diferenciais. As áreas das ciências exatas e da saúde carecem de conteúdos como este, que viabiliza a compreensão e a aplicação nos estudos que se referem à estrutura química de moléculas, especialmente aquelas biologicamente ativas, e suas interações com o meio biológico.

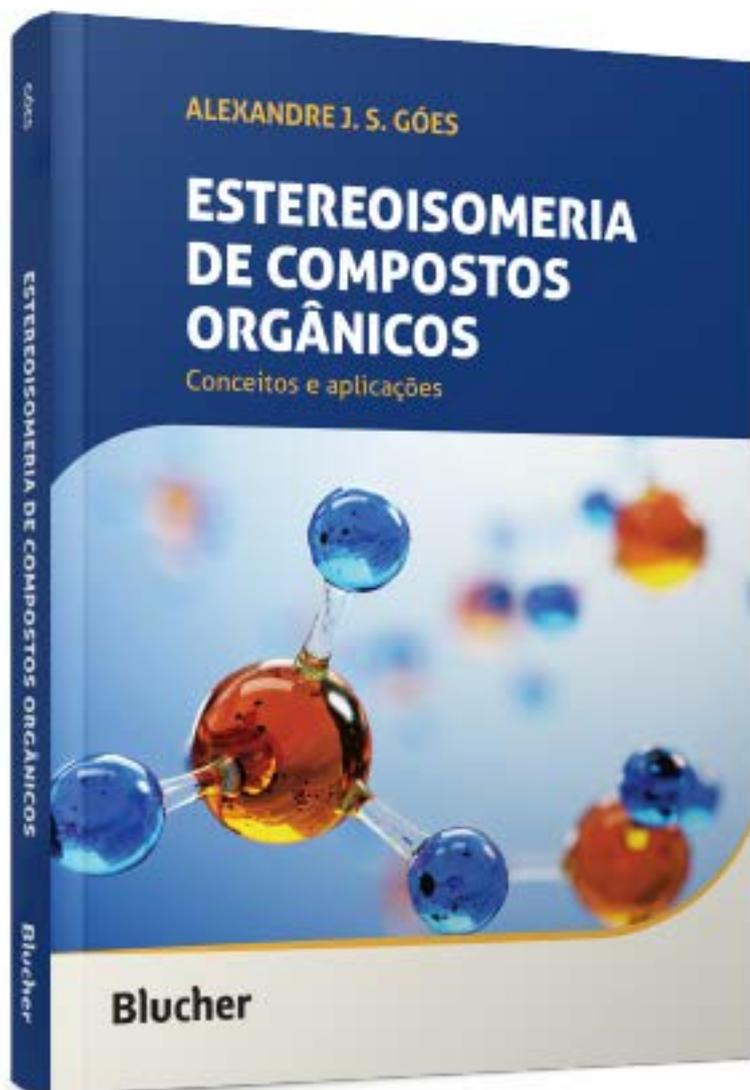
Diante disso e de sua abrangência, esta obra mostra-se uma ferramenta indispensável para alunos de cursos de graduação e pós-graduação em Química, Farmácia, Biologia, Medicina e áreas afins, além de servir como fonte de consulta para professores e pesquisadores que queiram se apropriar dos conteúdos em questão e suas aplicações.

www.blucher.com.br

ISBN 978-85-212-1432-8



Blucher



Clique aqui e:

VEJA NA LOJA

Estereoisomeria de Compostos Orgânicos

Conceitos e aplicações

Alexandre J. S. Góes

ISBN: 9788521214328

Páginas: 256

Formato: 17 x 24 cm

Ano de Publicação: 2019

Peso: 0.435 kg
