3. ESTEREOISOMERIA

- 1. Indique nos compostos seguintes, quais os centros estereogénicos:
 - a. 3-Bromopentano
 - b. 1-Bromo-2-metilbutano
 - c. 2-Bromo-2-metilbutano

Resolução:

a. Um carbono estereogénico tem 4 substituintes diferentes. Nenhum dos carbonos no 3bromopentano tem 4 substituintes diferentes pelo que não possui centros estereogénicos.

b. O carbono-2 é um centro estereogénico no 1-bromo-2-metilbutano.

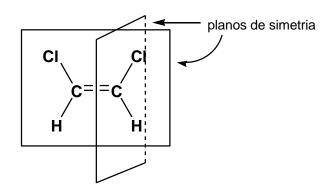
$$\begin{array}{c} \mathsf{H} \\ | \\ \mathsf{C} - \mathsf{CH}_2 \mathsf{CH}_3 \\ | \\ \mathsf{CH}_3 \end{array}$$

- c. Não existem centros estereogénicos no 2-bromo-2-metilbutano
- 2. Localize planos e / ou centros de simetria nos compostos:
 - a. (Z)-1,2-Dicloro-eteno
 - **b.** cis-1,2-Diclorociclopropano
 - c. trans-1,2-Diclorociclopropano

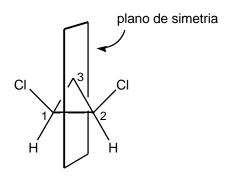
Resolução:

a. Existem dois planos de simetria no (*Z*)-1,2-Dicloro-eteno. Não existem centros de simetria. A molécula é aquiral.

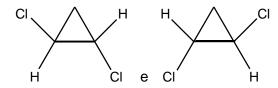
Química OG - 2018 . . .



b. Existe um plano de simetria no cis-1,2-diclorociclopropano que bissecta as ligações
 C-1-C-2 e passa por C-3. A molécula é aquiral.



c. O trans-1,2-diclorociclopropano não tem plano nem centro de simetria. Possui 2 imagens especulares não sobreponíveis. A molécula é quiral.



3. O colesterol, quando obtido de fontes naturais, é obtido como um só enantiómero. A rotação observada α de uma amostra de 0.3 g de colesterol em 15 ml de solução clorofórmica contida num tubo polarimétrico de 10 cm é –0.78°. Calcule a rotação específica do colesterol.

Resolução:

A equação que relaciona a rotação específica com a rotação observada é:

$$\left[\alpha\right] = \frac{100 \ \alpha}{c/}$$

onde c é a concentração expressa em g por 100 ml e / o comprimento do tubo do polarímetro em decímetro. Uma vez que neste caso a concentração é 0.3 g por 15 ml e o comprimento do tubo 10 cm, a rotação específica é

$$\left[\alpha\right] = \frac{100 (-0.78)}{100(0.3/15)(1)} = -39$$

ou seja, -39°.

4. Assinale a configuração absoluta *R* ou *S* dos seguintes compostos:

a.

$$H_3C$$
 $\stackrel{H}{\stackrel{\vdots}{=}}$
 C
 CH_2OH
 H_3CH_2C

(+)-2-Metil-1-butanol

b.

$$H_3C$$
 H_3CH_2C
 H_3CH_2C

(+)-1-Fluoro-2-metilbutano

Resolução:

a. O substituinte de maior prioridade no centro estereogénico do 2-metil-1-butanol é o CH₂OH; o de menor é o H. Nos restantes o etilo tem maior prioridade do que o metilo.

A ordem de precedência é $CH_2OH > CH_3CH_2 > CH_3 > H$

Colocando o substituinte de menor precedência (H) o mais afastado de nós, redesenhando a molécula como um guarda-chuva invertido

verificamos a direcção dos ponteiros do relógio quando obedecemos à ordem de prioridade; trata-se da configuração R. O composto desenhado é o (R)-(+)-2-metil-1-butanol.

b. Aqui a resolução é análoga ao efectuado anteriormente.

$$H_3C$$
 $\stackrel{\stackrel{\leftarrow}{=}}{C}$
 CH_2F
 H_3CH_2C

ordem de precedência: $CH_2F > CH_3CH_2 > CH_3 > H$

Re-desenhando a molécula como um guarda-chuva invertido com o substituinte de menor prioridade o mais afastado de nós

seguindo a ordem de prioridade dos substituintes verificamos ser no sentido dos ponteiros do relógio. A configuração absoluta é R; o composto é o (R)-(+)-1-fluoro-2-metilbutano.

5. O ácido tartárico, CO₂HCH(OH)CH(OH)CO₂H, possui 3 estereoisómeros, apesar de possuir 2 centros estereogénicos. Desenhe-os utilizando a notação traço-cunha e projecções de Fischer e, atribua as configurações absolutas aos centros estereogénicos.

Resolução:

Utilizando as projecções de Fischer, verificamos que apenas é possível desenhar 3 estereoisómeros:

$$CO_2H$$
 CO_2H CO_2H

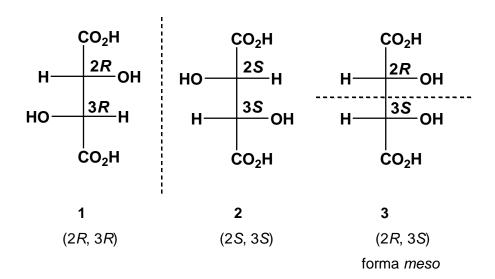
Os estereoisómeros 1 e 2 representam um par de enantiómeros:

Química OG - 2018 .

$$CO_2H$$
 CO_2H
 CO_2H
 CO_2H
 CO_2H
 CO_2H
 CO_2H
 CO_2H
 CO_2H
 CO_2H

O estereoisómero 3, é um diastereómero de 1 e de 2 e tem um plano de simetria:

pelo que não possui enantiómero (metade da molécula é a imagem especular da outra metade). Trata-se do estereoisómero *meso*, o qual é opticamente inactivo pelo que se expôs. Sendo assim, atribuindo as configurações absolutas aos centros estereogénicos, temos para os ácidos tartáricos:



Desenhando as estruturas utilizando a notação traço-cunha, temos:

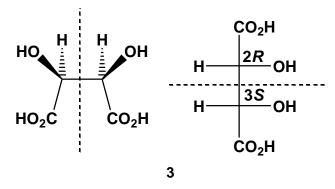
Química OG - 2018

$$H$$
 OH CO_2H
 HO_2C
 H
 HO_2C
 H
 HO_2C
 HO_2H
 HO_2C
 HO_2H
 HO_2C
 HO_2H
 HO_2C
 HO_2H

(2R, 3R)-Ácido tartárico (mp 170 °C, $[\alpha]_D$ + 12°)

HO₂C
$$\frac{2S}{H}$$
 $\frac{2S}{H}$ $\frac{3S}{CO_2H}$ $\frac{3S}{CO_2H}$ $\frac{3S}{CO_2H}$ $\frac{3S}{CO_2H}$

(2S, 3S)-Ácido tartárico (mp 170 °C, $[\alpha]_D$ - 12°)



meso-Ácido tartárico (mp 170 °C, opticamente inactivo)

Problemas propostos:

P1. Quais das seguintes estruturas são equivalentes?

Química OG - 2018

- a. AeB
- b. AeC
- c. BeC
- d. A, BeC

P2. Qual dos compostos é quiral?

- a. 1,1-Dibromo-1-cloropropano
- b. 1,1-Dibromo-3-cloropropano
- c. 1,3-Dibromo-1-cloropropano
- d. 1,3-Dibromo-2-cloropropano

P3. Um composto meso:

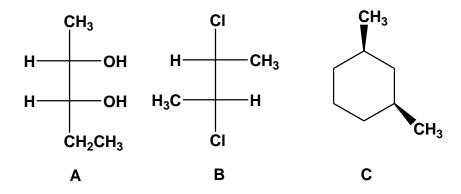
- a. É uma molécula aquiral que contém centros estereogénicos
- b. Contém um plano de simetria ou um centro de simetria
- c. É opticamente inactivo
- d. É caracterizado por tudo o referido anteriormente

P4. O 2,3-dicloropentano abaixo representado é:

$$CH_3$$
 H
 CI
 CI
 CH_2CH_3

- **a.** 2R, 3R
- **b.** 2*R*, 3*S*
- **c.** 2S, 3R
- **d.** 2*S*, 3*S*

P5. Quais dos seguintes compostos são meso?



Química OG - 2018

- a. Somente A
- b. Somente C
- **c.** A e B
- d. BeC