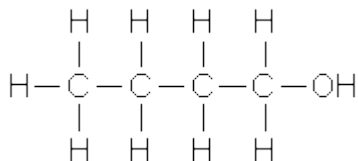


# ISOMERIA

## 1. ISOMERIA CONSTITUCIONAL (Isomeria plana)

### 1.1 Conceito de Isomeria

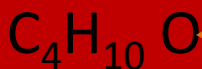
São dois ou mais compostos diferentes que apresentam a mesma fórmula molecular. A existência de isômeros é denominada ISOMERIA ou ISOMERISMO.



Butan-1-ol



Éter dietílico

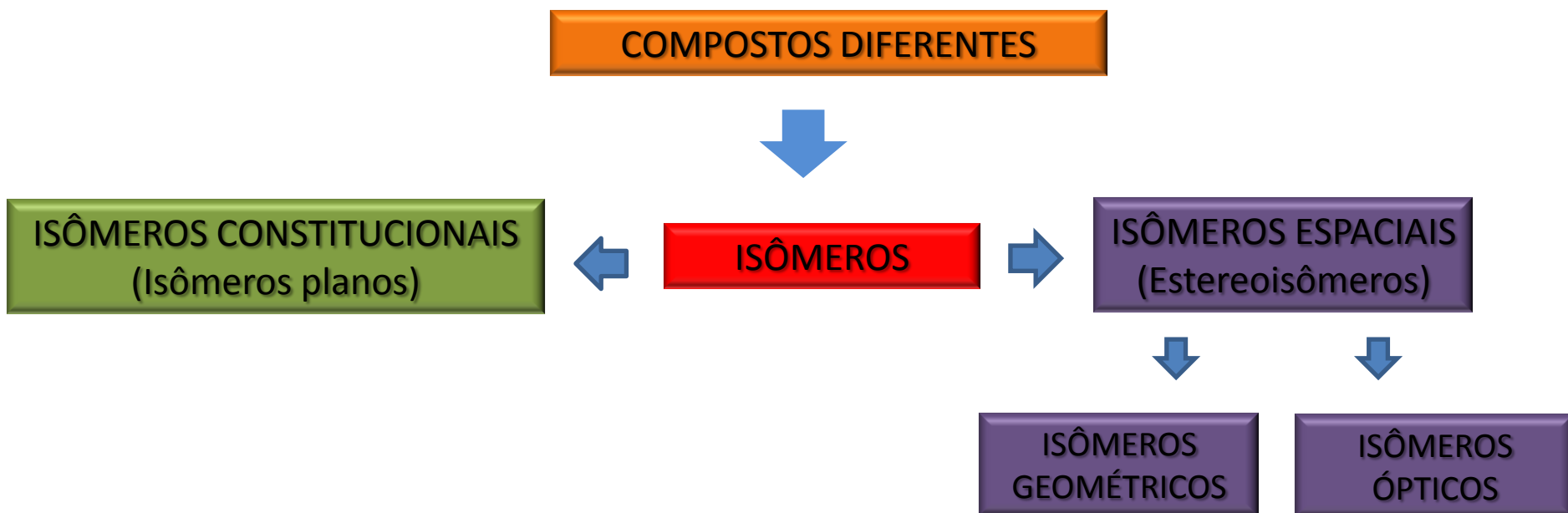


Mesma fórmula molecular

Número teoricamente possível de isômeros para alguns hidrocarbonetos do tipo <b>ALCANO</b>	
Fórmula Molecular	Número de isômeros possíveis
$C_4H_{10}$	2
$C_5H_{12}$	3
$C_6H_{14}$	5
$C_7H_{16}$	9
$C_8H_{18}$	18
$C_9H_{20}$	35
$C_{10}H_{22}$	75
$C_{15}H_{32}$	4.347
$C_{40}H_{82}$	62.491.178.805.831

Quando dá para perceber a diferença entre dois isômeros observando a fórmula estrutural plana, dizemos que é um caso de **ISOMERIA CONSTITUCIONAL** OU **ISOMERIA PLANA**.

Quando é necessário analisar a estrutura espacial das moléculas para perceber a diferença entre os isômeros chamamos de **ESTREOISOMEROS** OU **ISOMERIA ESPACIAL**.



## 1.1 Classificação dos Isômeros Constitucionais

Possíveis diferenças entre isômeros Constitucionais.

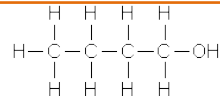
Classificar isômeros é dizer qual principal diferença entre eles. São divididos em cinco grupos:

1. Isômeros de Função ou funcionas
2. Tautômeros
3. Isômeros de cadeia
4. Isômeros de posição
5. Isômeros de Compensação ou Metâmeros

# Isômeros Constitucionais (Isômeros planos)

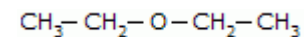
Existe equilíbrio químico entre eles?

Isômeria de Função



$\text{C}_4\text{H}_{10}$

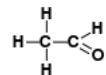
Álcool



Éter

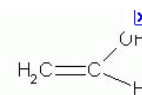
Principal diferença: Isômeros pertencem a classes funcionais diferentes.

Tautomeria



$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$

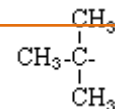
Aldeído



Enol

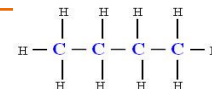
Coexistem em equilíbrio químico - Tautômeros

Isômeria de cadeia



$\text{C}_4\text{H}_{10}$

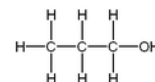
Ramificada



linear

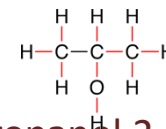
Mesma classe funcional – diferem em algum item da sua classificação

Isômeria de posição



$\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$

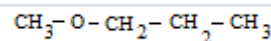
Propanol1



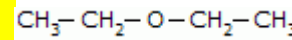
Propanol 2

Mesma classe funcional – diferem em algum item da sua classificação

Metameria (Isômeria de compensação)



$\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$



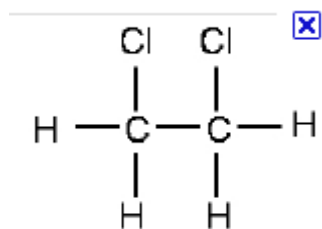
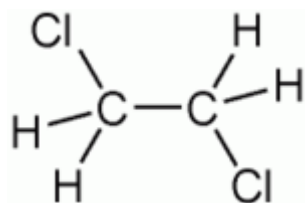
Éter metil propílico

Éter dietílico

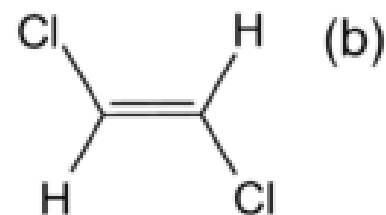
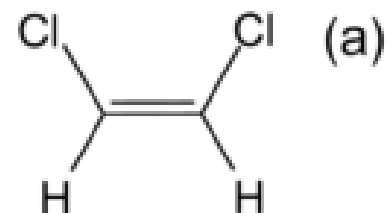
Posição de um hetroátomo na cadeia

## 2. ISOMERIA GEOMÉTRICA (Isomeria *CIS-TRANS*)

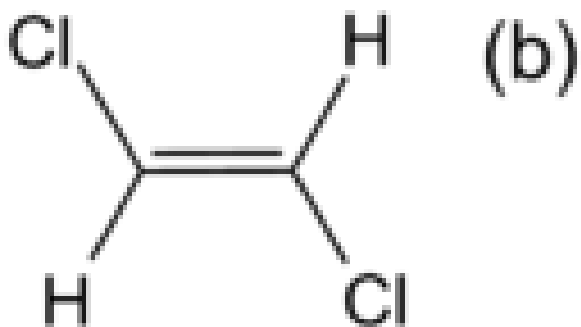
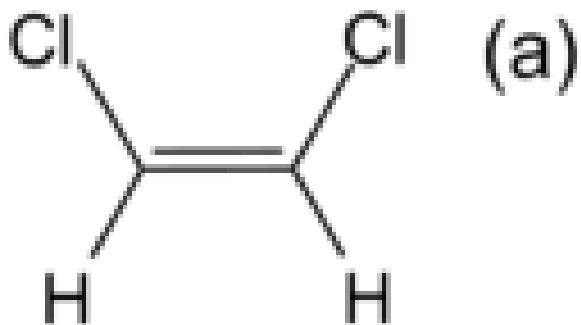
### 2.1 Isomeria geométrica em compostos com dupla ligação



Representam a mesma substância?



Representam a mesma substância?



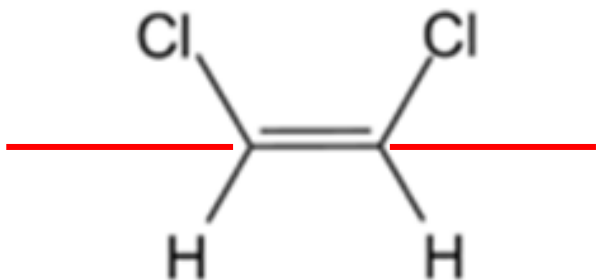
Podemos dizer que são isômeros, pois são compostos diferentes e apresentam a mesma fórmula molecular:  $C_2H_2Cl_2$



A diferença entre esses dois compostos está na disposição geométrica dos grupos ligados ao carbono da dupla.

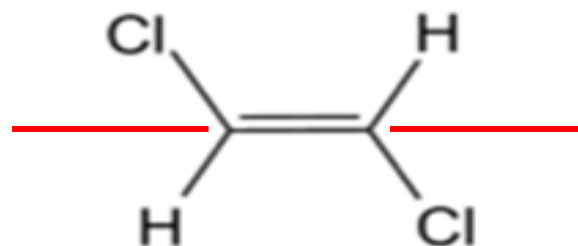
A isso chamamos ISOMERIA GEOMÉTRICA, e esses isômeros são diferenciados por meio dos prefixos *CIS* e *TRANS*.

A ligação dupla divide o espaço em dois planos: um acima e outro abaixo da ligação  $\pi(\pi)$ .



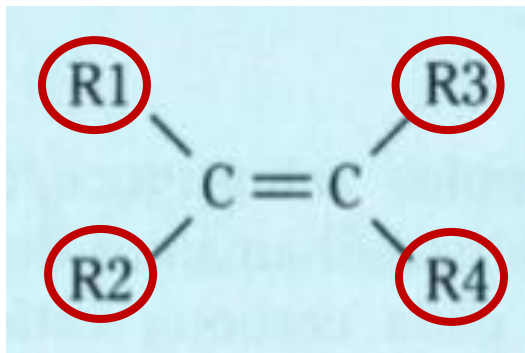
Cis-1,2-dicloro-eteno

Estruturas  
mostrando a  
geometria dos  
isômeros



Trans-1,2-dicloro-eteno

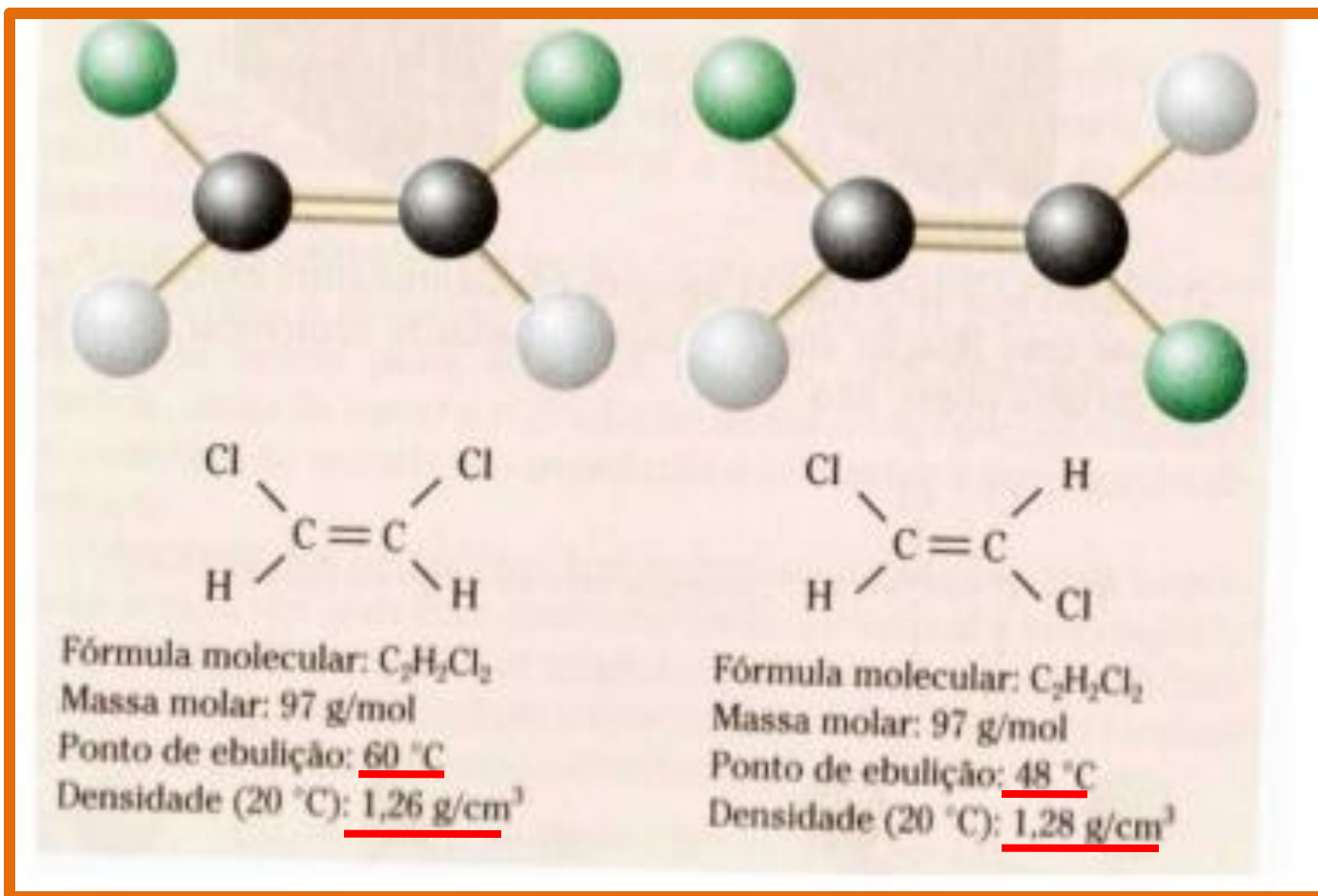
Para dois compostos serem Isômeros Geométricos



$R1 \neq R2$   
 $R3 \neq R4$

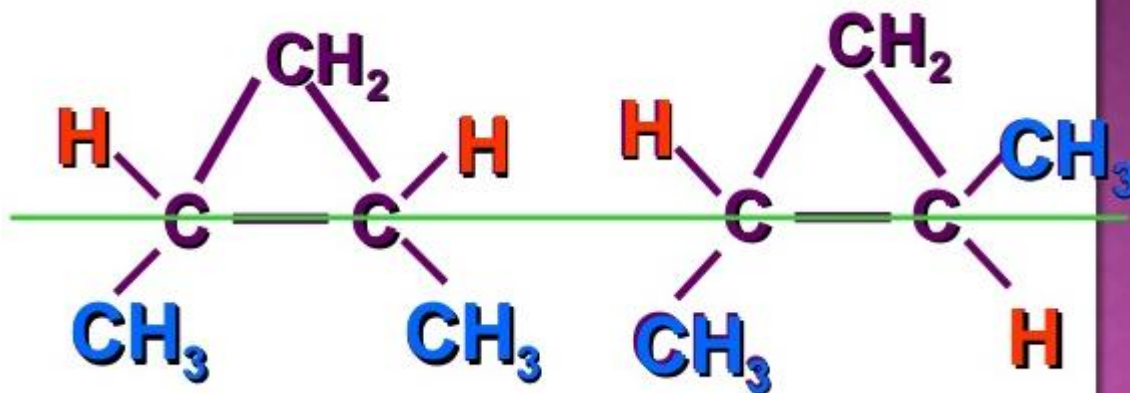


Isômeros CIS e TRANS possuem propriedades físicas diferentes:



## 2.2 - Isomeria geométrica em compostos cíclicos

O ciclo assim como na dupla ligação, não permite livre rotação ao redor da ligação.

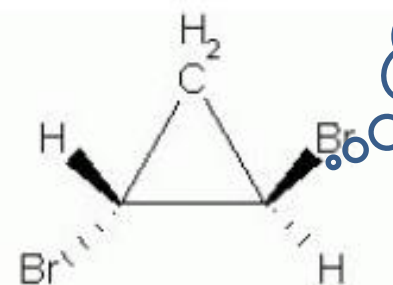


CIS

TRANS



cis-1,2- dibromo ciclopropano



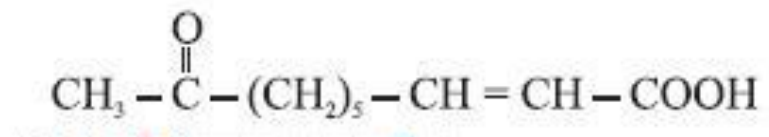
trans-1,2- dibromo ciclopropano

R1 ≠ R2

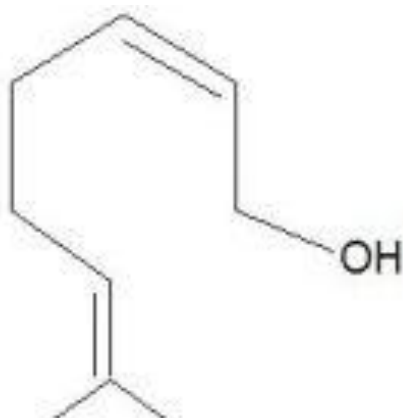
R3 ≠ R4

Exemplos:

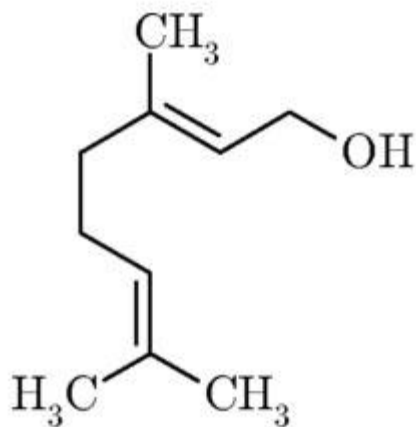
- Feromônio da abelha rainha com efeito regulador sobre a colônia é o isômero TRANS.



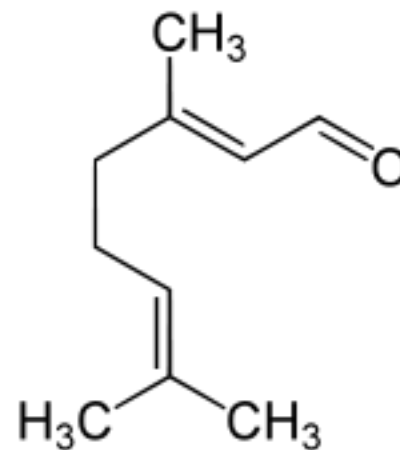
- Aroma das rosas



Citronelol



Geraniol

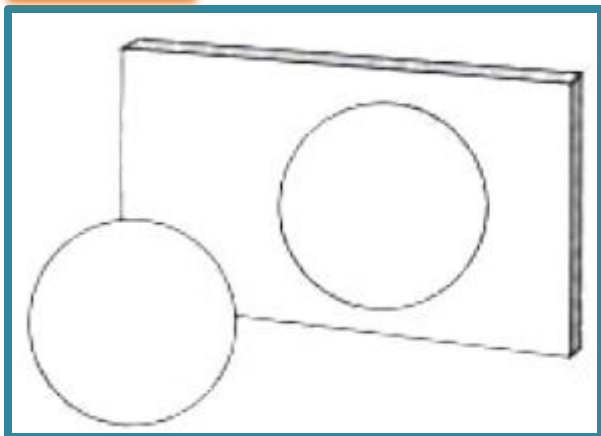


Neral

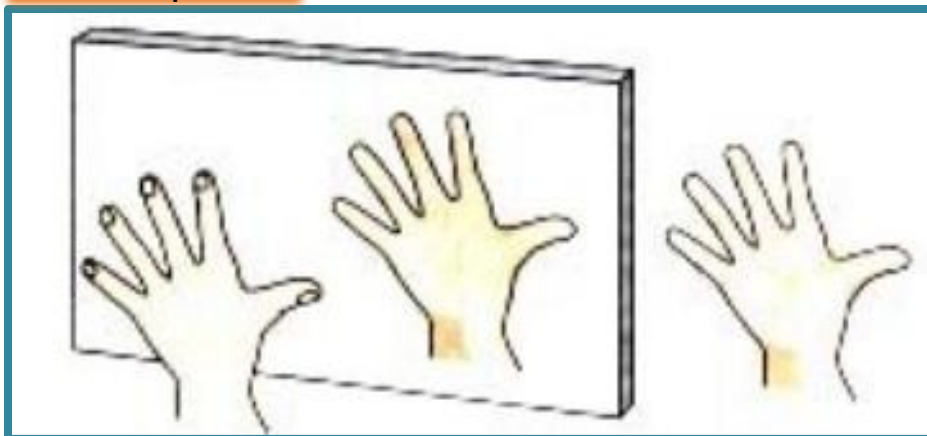
## 2. ISOMERIA ÓPTICA

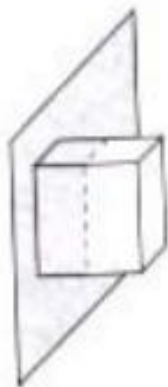
Substâncias que possuem mesma fórmula molecular e diferentes arranjos espaciais. Esses arranjos diferenciados, tornam os compostos diferentes, produzindo diferentes efeitos fisiológicos.

Esfera:



Mãos e pés:





Possuem  
plano de  
simetria

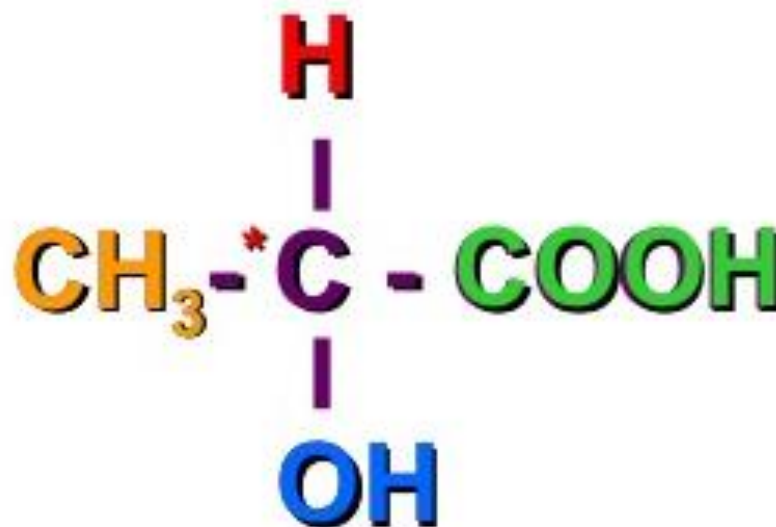


Não possuem  
plano de  
simetria

## Condição para ocorrência de Isomeria Óptica:

- Presença de carbono quiral ou assimétrico, que torna a substância opticamente ativa.

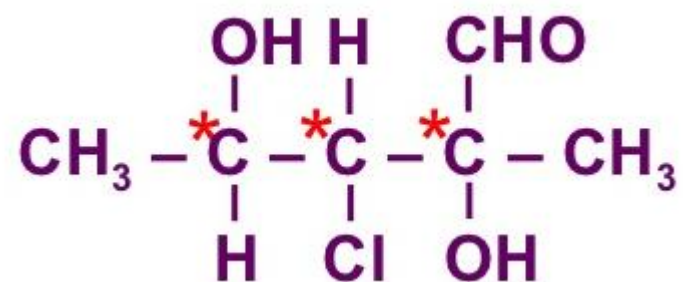
Carbono Assimétrico: ligado a quatro grupos diferentes entre si.



## Cálculo do número de isômeros opticamente ativos

- Isômeros opticamente ativos:  $2^n$
- Isômeros opticamente inativos :  $2^{n-1}$
- Onde n é o número de C\* assimétricos diferentes.

EX.:



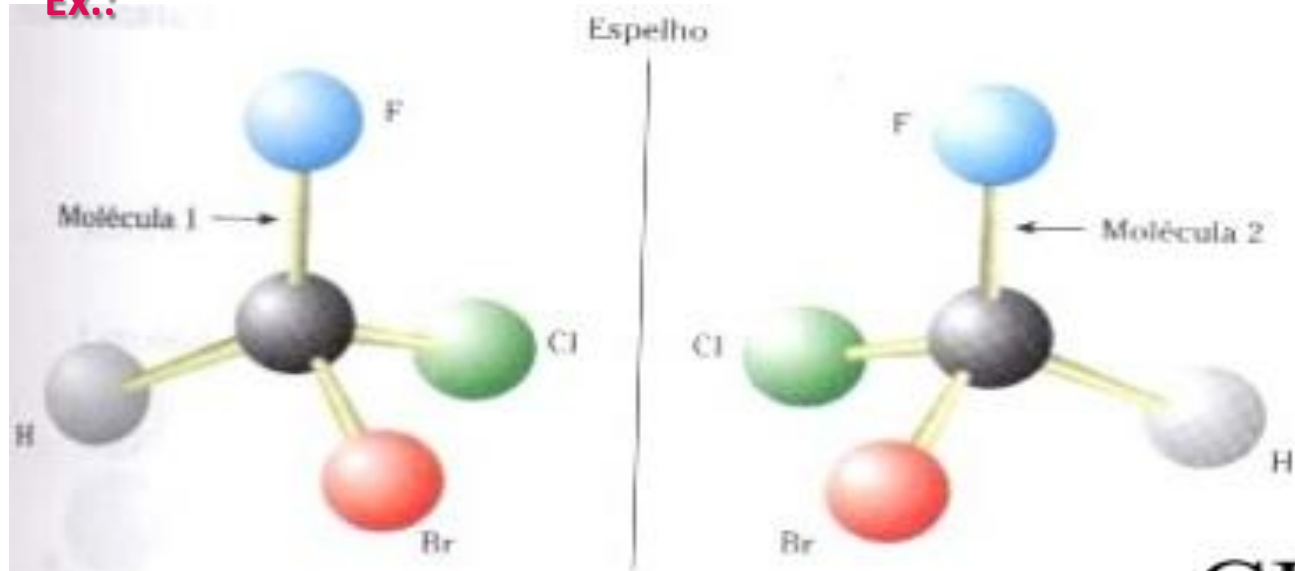
**Isômeros Ativos**

$$2^n$$

$$2^3 = 8$$

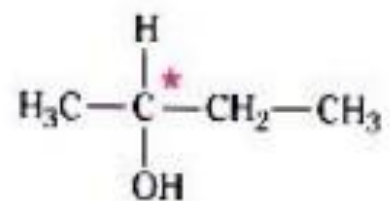


Ex.:

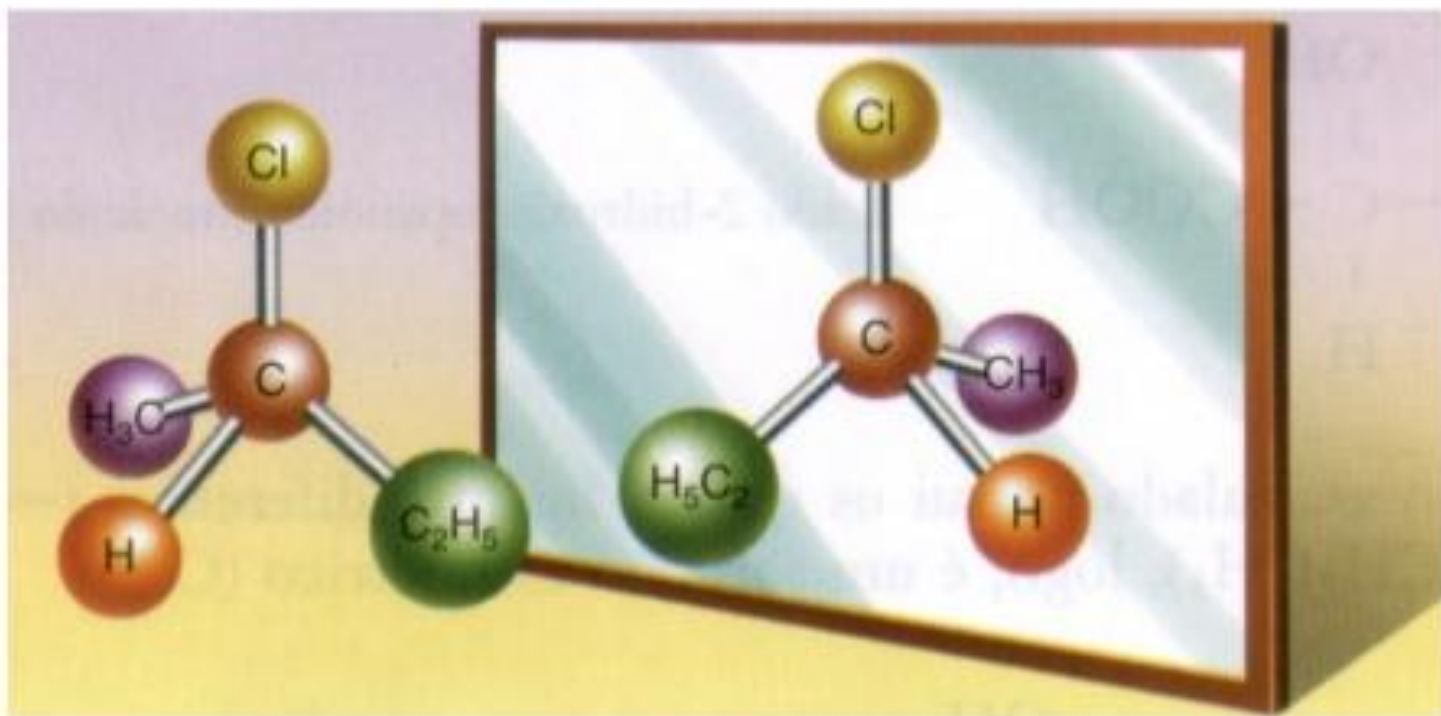


**CHFBrCl**  
(Fórmula molecular)

Ex.:



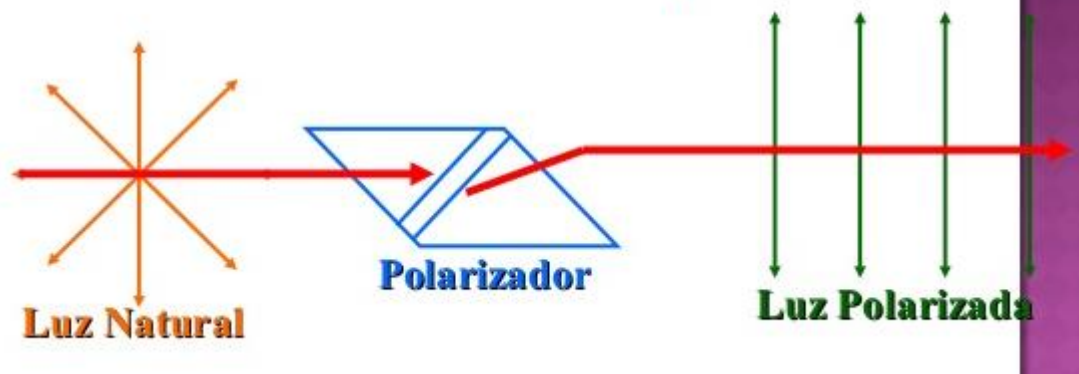
butan-2-ol



## 2.2 – Atividade Óptica

**Atividade Óptica** está ligada a **assimetria molecular**. Moléculas que apresentam carbono quiral ou assimétrico, consequentemente, são assimétricas: desviam o plano da luz polarizada.

A luz polarizada é obtida fazendo-se passar um feixe de luz natural por dispositivos chamados de **polarizadores**. Um dos mais comuns é o **prisma de Nicol**.

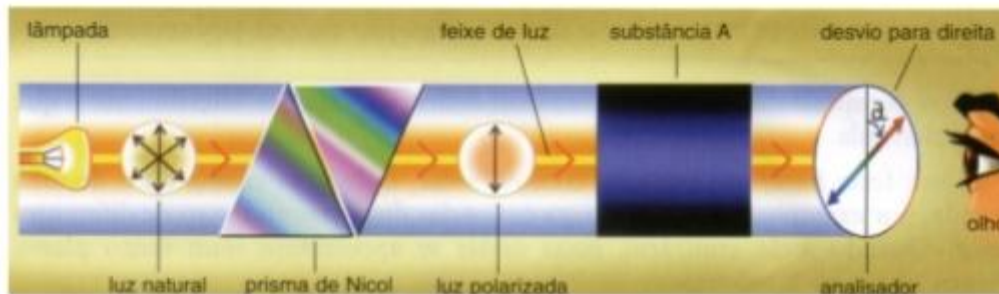


Moléculas que **desviam** o plano da luz polarizada – são opticamente **ativas**

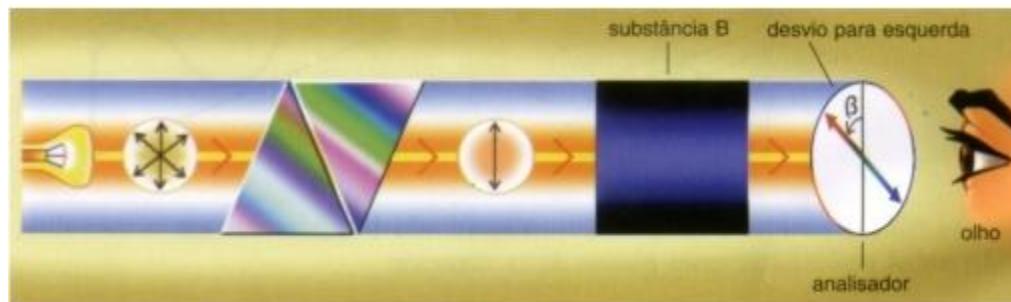
Moléculas que **não desviam** o plano da luz polarizada – são opticamente **inativas**

- Substâncias Ópticamente ativas:

**Dextrógiro, (d) ou (+) - desvia o plano de luz para a direita.**



**Levógiro, (l) ou (-): desvia o plano de luz para a esquerda.**

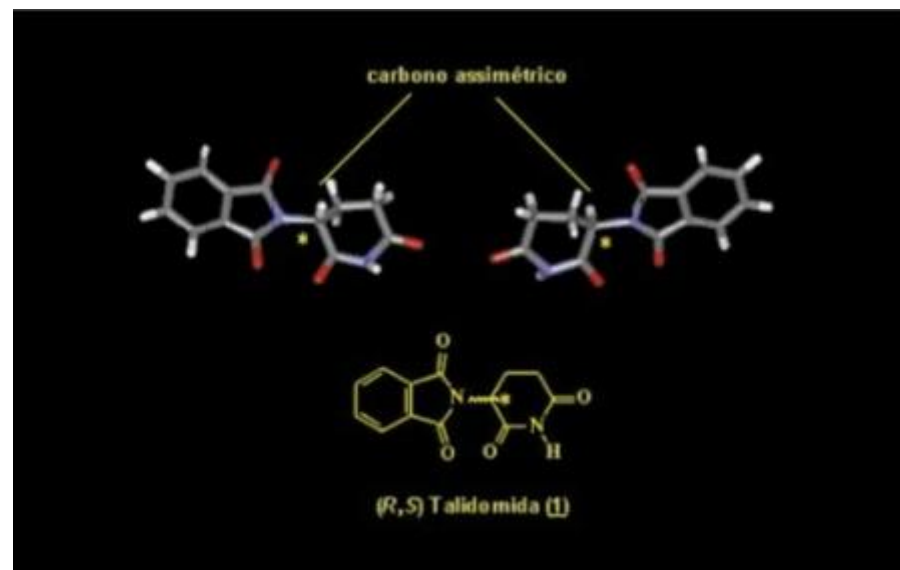
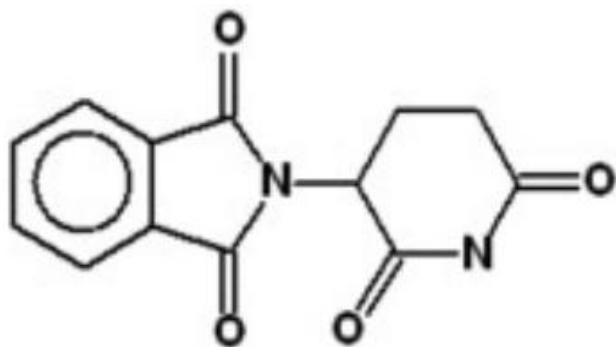


## 1. TALIDOMIDA

No início da década de , a Alemanha apresentou diversos casos de crianças que nasciam deformadas. Pesquisa mostrou que a má formação era devido a L-Talidomida

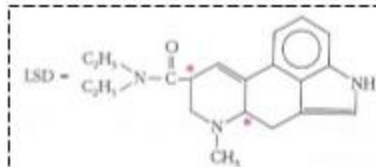


## Talidomida



## 2. LSD

1 O Isômero destrógiro do LSD causa alucinações enquanto que o isômero levógiro não produz nenhum efeito.



O LSD é extraído de uma flor conhecida como Mornig Glory

### 3. LIMONENO

Nobel - KNOWLES, NOYORI E SHARPLESS, em 2001.

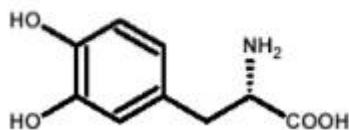
Criaram métodos de obter um produto puro específico, eliminando a versão quiral indesejada – Síntese com catálise assimétrica.

Ex.: Limoneno

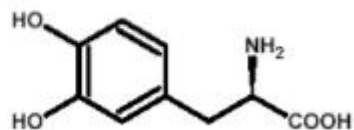


## 4. L-DOPA

L-DOPA remédio para o tratamento de Mal de Parkinson



**S-dopa**  
(remédio)

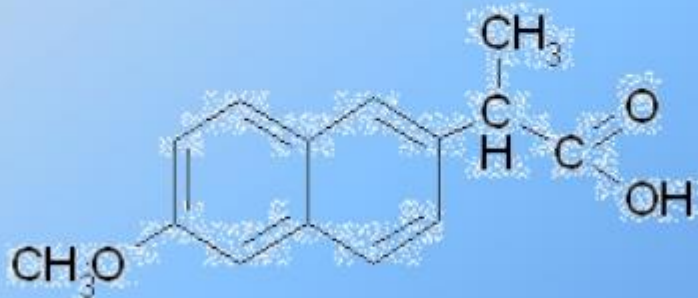


**R-dopa**  
(tóxico e inativo)



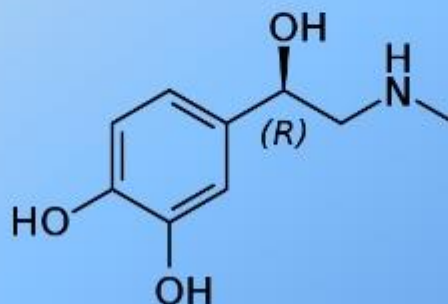
## 5. NAXOPRENO

- O Naproxeno possui um carbono quiral, logo apresenta dois isômeros ópticos. Um deles tem ação antiinflamatória e o outro causa danos ao fígado.



## 6. ADRENALINA

- A adrenalina ou epinefrina possui um centro quiral, logo são possíveis dois isômeros ópticos, mas apenas um deles possui efeito fisiológico no nosso organismo (acelera os batimentos cardíacos numa situação de stress).



**Nobel - KNOWLES, NOYORI E SHARPLESS, em 2001.**

Criaram métodos de obter um produto puro específico, eliminando a versão quiral indesejada – Síntese com catálise assimétrica.