

Isomeria

(iso = mesma(s); meros = partes).

A Isomeria é o fenômeno pelo qual duas ou mais substâncias diferentes de mesma fórmula molecular, com fórmulas estruturas diferentes. A Isomeria é dividida, para fins de estudo, em duas categorias: Plana e Espacial ou Estereoisomeria.

A - Isomeria plana

A Isomeria Plana, é facilmente verificável através da representação de fórmula estrutural plana das moléculas das diferentes substâncias.

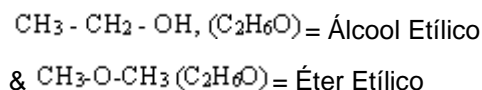
Estes isômeros apresentam propriedades físicas diferentes (PF, PE, D, reações. Etc..).

São cinco os casos de Isomeria Plana.

A.1 - Isomeria Plana de Função

Os isômeros pertencem à funções diferentes

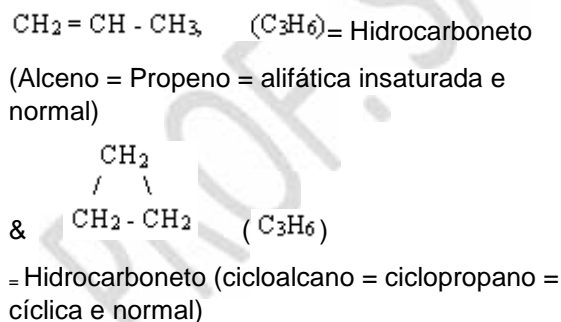
Ex:



A.2 - Isomeria Plana de Cadeia ou de Núcleo.

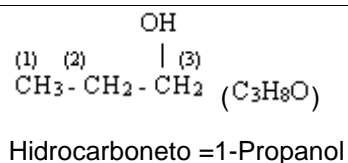
Isômeros pertencem à mesma função, mas apresentam cadeias diferentes.

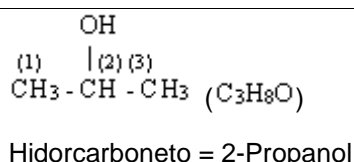
Ex:



A.3 - Isomeria Plana de Posição

Os Isômeros pertencem à mesma função e têm o mesmo tipo de cadeia, mas apresentam diferença na posição de um grupo funcional, ramificação ou insaturação. Exemplos:

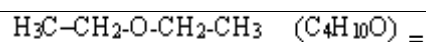




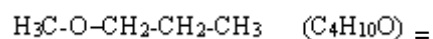
A.4 - Isomeria de Compensação ou Metameria

Esses isômeros se caracterizam pela presença de heteroátomo em posição diferentes. (meta = mudança). Os isômeros pertencem à mesma função e o mesmo tipo de cadeia, mas existe a diferença na posição de um heteroátomo, é um caso particular de isomeria de posição.

Exemplos:



ÉTER → etoxi-etano

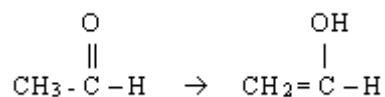


ÉTER → metoxi-propano

A.5 - Isomeria Dinâmica ou Tautomeria

Caso particular da isomeria de função, no qual os isômeros coexistem em equilíbrio dinâmico em solução (tautos = dois de si mesmo). Os principais casos da tautomeria envolvem compostos carbonílicos. Exemplos:

Aldoenólica = aldeído \leftrightarrow enol.



(Aldeído / Etanal) → (Enol / Etenol)

OBS: soluções com dois tautômeros é chamada Alelotrópica.

B - Isomeria espacial ou Estereoisomeria.

Os isômeros espaciais possuem a mesma fórmula molecular e diferenciando apenas nas fórmulas estruturais espaciais, ou seja, as ligações dispostas ou orientada de maneiras diferentes. Os isômeros espaciais podem ser divididos em geométricos e ópticos.

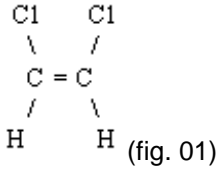
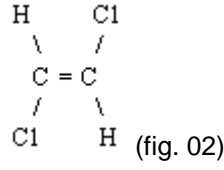
B.1 - Isomeria geométrica

Na isomeria geométrica, os compostos que possuem a distribuição espacial diferentes. Os isômeros podem ser classificados como Cis ou Z - pelo hidrogênio ou nº atômico juntos no mesmo lado do plano de simetria, e Trans ou E - em lados opostos do plano de simetria. Ocorre na duplas ligação ou cadeia fechada.

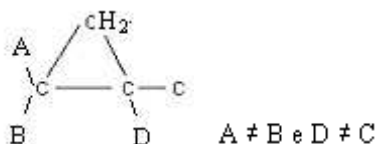
Estes isômeros apresentam propriedades físicas diferentes (PF, PE, densidade, reações. Etc..)

a) Compostos alifáticos (cadeia aberta) = precisa ter ligantes diferentes em cada carbono da ligação dupla.

Exemplos: o composto 1,2-dicloro-etileno, com fórmula molecular $C_2H_2Cl_2$, temos duas possibilidades:

 <p>(fig. 01)</p>	 <p>(fig. 02)</p>
<p>*Os ligantes (H) estão no mesmo plano = Cis.</p> <p>*A soma dos ligantes da parte superior é $2 Z_{Cl} = 17 + 17 = 34$ maior que a da inferior $2 Z_H = 1 + 1 = 2$. Seu nome será: Z ou cis-1,2-dicloroeteno</p>	<p>*Os ligantes (H) estão em planos diferentes = Trans.</p> <p>*A soma dos ligantes da parte superior é $Z_{Cl} + Z_H = 17 + 1 = 18$ igual a da inferior $Z_H + Z_{Cl} = 17 + 1 = 18$. Seu nome será: E ou trans-1,2-dicloroeteno</p>

b) Compostos de cadeia fechada = pelo menos dois carbonos no ciclo com ligantes diferentes.

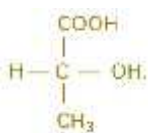


B.2 - Isomeria óptica

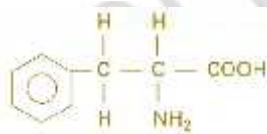
Os compostos apresentam a mesma fórmula molecular entretanto, desviam diferentemente o plano da luz polarizada.

Condições de existência: presença de carbono quiral ou assimétrico (é o carbono ligado a ligantes diferentes ou quiro; do grego quiros = mão).

Exemplos:



Ácido Láctico o carbono central é assimétrico ou quiral.



o carbono ligado ao COOH é quiral ou assimétrico.

Os isômeros podem ser classificados em: Dextrógiros (D) - desviam a luz plano-polarizada para a direita

Levógiros (L) - desviam a luz plano-polarizada para a esquerda.

Antípodos ópticos ou enantiomorfos ou antípodos ópticos = 2 isômeros opticamente ativos com o mesmo ângulo de desvio.

O isômero racêmico ou mistura racêmica d(l) ou (r) = São mistura em quantidades equimoleculares de antípodos ópticos. É um isômero inativo. Estes isômeros apresentam propriedades físicas iguais (PF, PE, densidade, Etc.), sendo possível identificá-los, somente pelo desvio da luz polarizada.

Cálculo de isomeria óptica ativa (IOA): Van'T Hoff e Lê Bel

Cálculo de isômeros opticamente ativos (IOA).

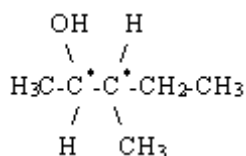
$n^{\circ}(\text{IOA}) = 2^n$ onde n é o número de carbonos assimétricos ($D_1L_1, D_2L_2, \text{etc...}$ antípodas ópticos).

Cálculo de isomeria óptica inativa (IOI):

$n^{\circ}(\text{IOI}) = 2^{n/2}$ ou $(\text{IOA}) / 2^{n-1}$ ($D_1+L_1 = R_1, D_2+L_2 = R_2, \text{etc...}$).

OBS: quando os quirais são iguais não aplicamos o cálculo, pois os isômeros serão inativos e o chamamos de Meso e nesse caso existirão dois IOA (um levógiro e um dextrógiro) um IOI (meso) no qual o desvio de um anula o desvio do outro por serem iguais e de direção opostas é uma mistura racêmica.

Ex.: o composto apresenta 2 carbonos quirais.

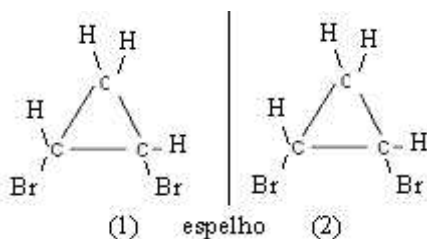


$$\text{IOA} = 2^n = 2^2 = 4$$

$$\text{IOI} = 2^{n-1} = 2^1 = 2$$

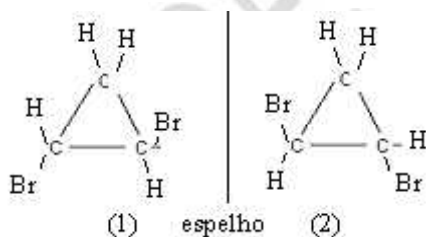
Isomeria óptica em moléculas cíclicas.

Dado o composto cis-2,3-dibromociclopropano



As estruturas (1) e (2) nós dá indicação da inexistência de isômeros ópticos.

Por outro lado, se tivermos o composto trans-2,3-ciclopropano



Podemos observar que as estruturas (1) e (2) nos indica que elas são isômeros opticamente ativos e como consequência teremos os isômeros:

(D)- trans-2,3-dibromociclopropano e

(L)- trans-2,3-dibromociclopropano