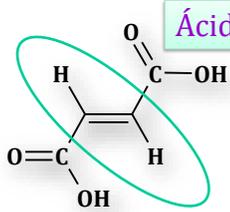


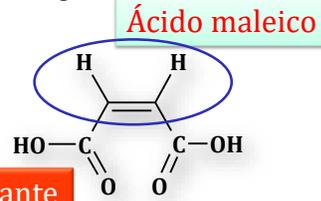
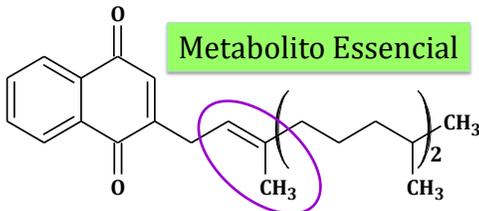
ESTEREOQUÍMICA

Isomeria geométrica - Exemplos Biológicos



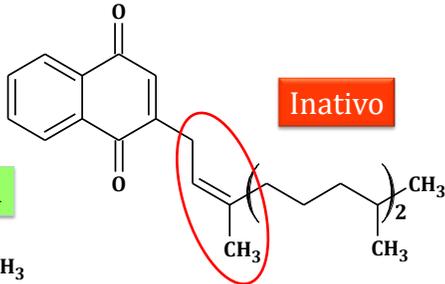
Metabolito Essencial

Vitamina K1



Tóxico Irritante

Inativo

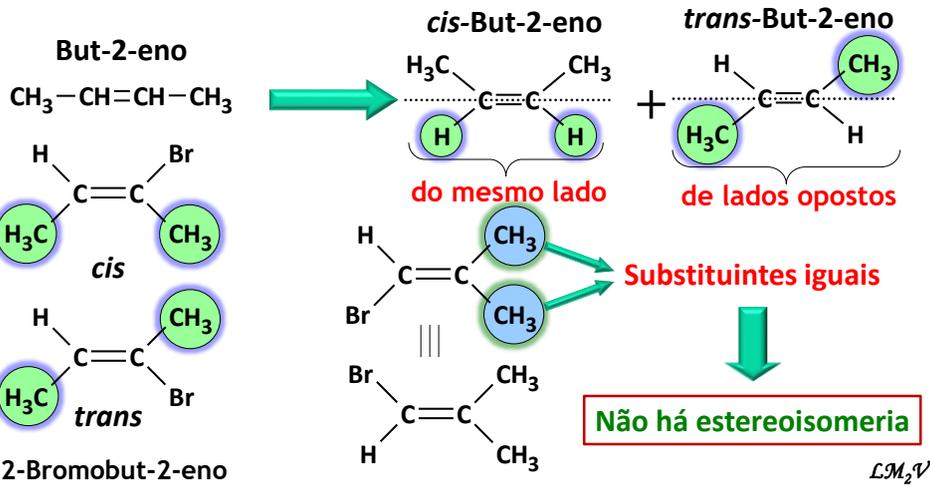


LM₂V

ESTEREOQUÍMICA

Isomeria geométrica - cis/trans

P. ebulição	4 °C	1 °C
P. fusão	- 139 °C	-106 °C

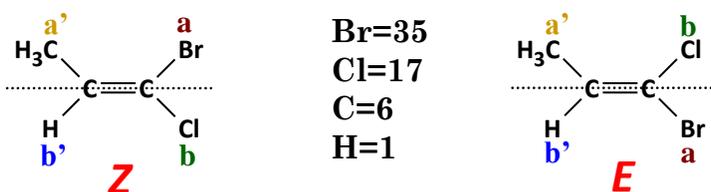


LM₂V

ESTEREOQUÍMICA

Isomeria geométrica - E/Z

- 1 – Observar cada um dos átomos de carbono da dupla ligação independentemente, identificar os átomos a eles ligados e seriar por **ordem decrescente de nº atómico**.
- 2 – Notar se os grupos prioritários em cada carbono **estão do mesmo lado ou de lados opostos da dupla ligação**.
- 3 – Grupos prioritários do **mesmo lado** da dupla ligação – **Z**
Grupos prioritários do **lado oposto** da dupla ligação – **E**

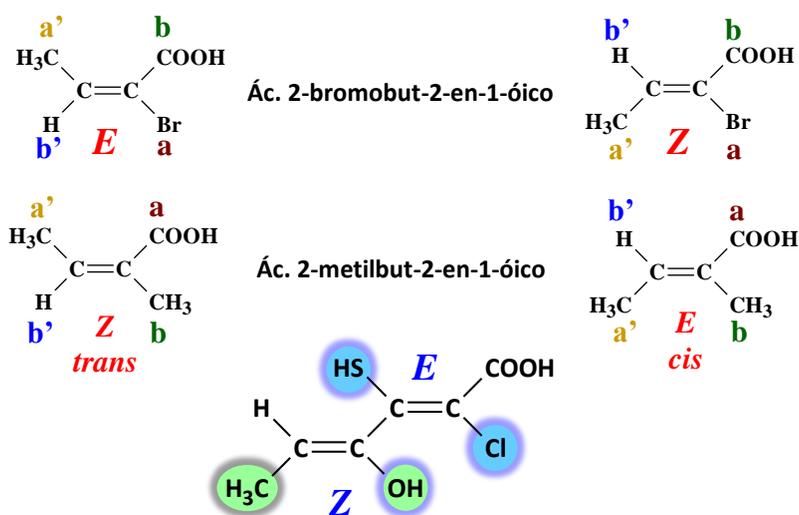


1-bromo-1-cloroprop-1-eno

LM₂V

ESTEREOQUÍMICA

Isomeria geométrica - cis/trans e E/Z

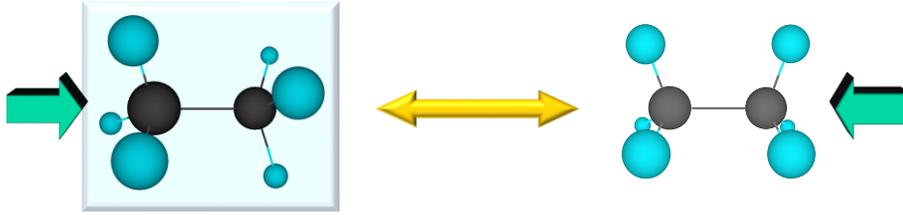


Ác. (2E, 4Z)-2-cloro-4-hidroxi-3-sulfanilo-hexa-2,4-dien-1-óico

LM₂V

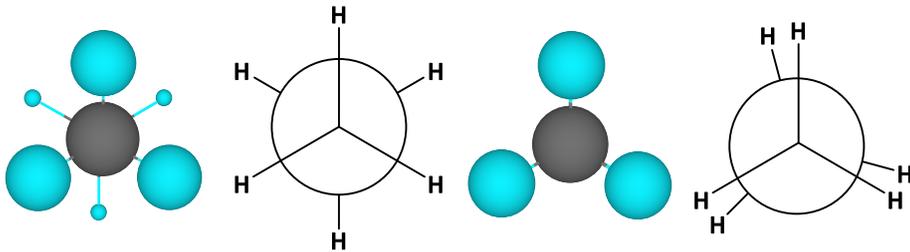
ESTEREOQUÍMICA

Análise conformacional - Etano



Estrela ou
alternada

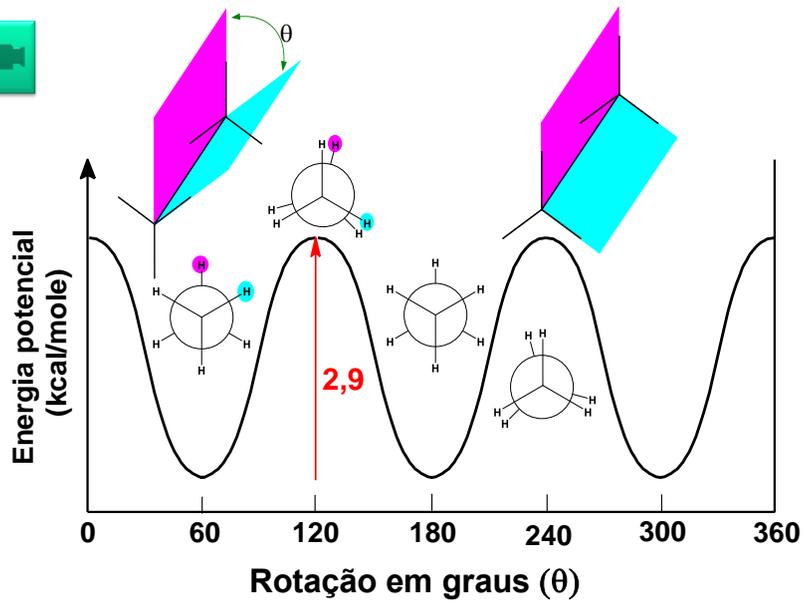
Eclipse



LM₂V

ESTEREOQUÍMICA

Análise conformacional - Energia torsional

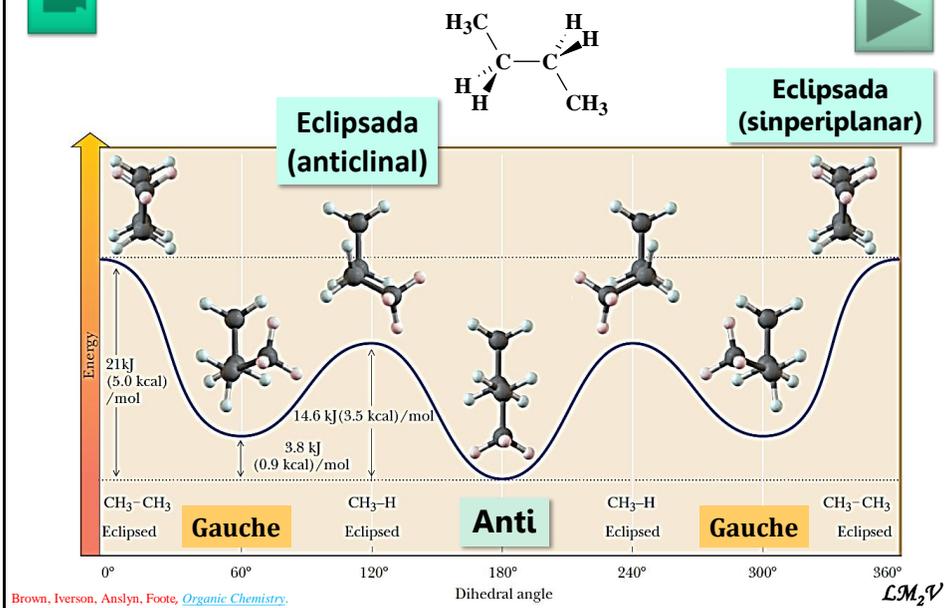


LM₂V



ESTEREOQUÍMICA

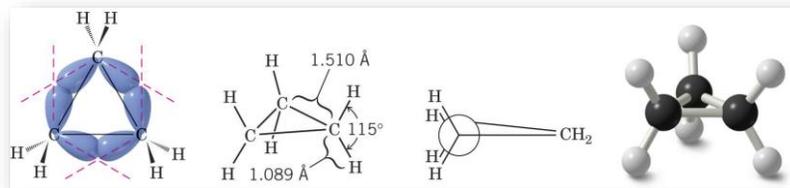
Análise conformacional - Butano



ESTEREOQUÍMICA

Análise conformacional - Ciclopropano

Ciclopropano



Ângulo interno – 60°

Maior tensão de anel

Planar

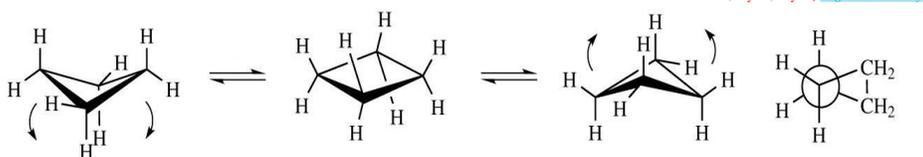
Ligações eclipsadas

Fraca sobreposição das orbitais na ligação C-C

ESTEREOQUÍMICA

Análise conformacional - Ciclobutano

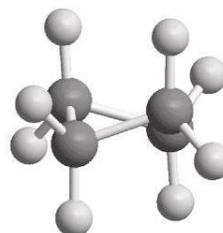
Ciclobutano



Ângulo interno – 90°

Alta tensão de anel

**Confórmeros não planares para
minimizar as ligações eclipsadas**

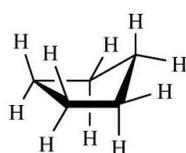
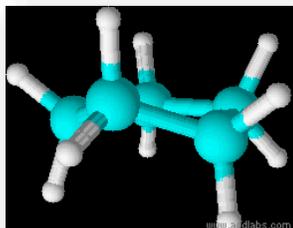


LM₂V

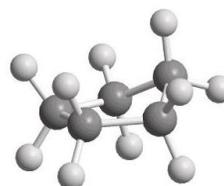
ESTEREOQUÍMICA

Análise conformacional - Ciclopentano

Ciclopentano



envelope conformation



Ângulo interno – 108°

Baixa tensão de anel

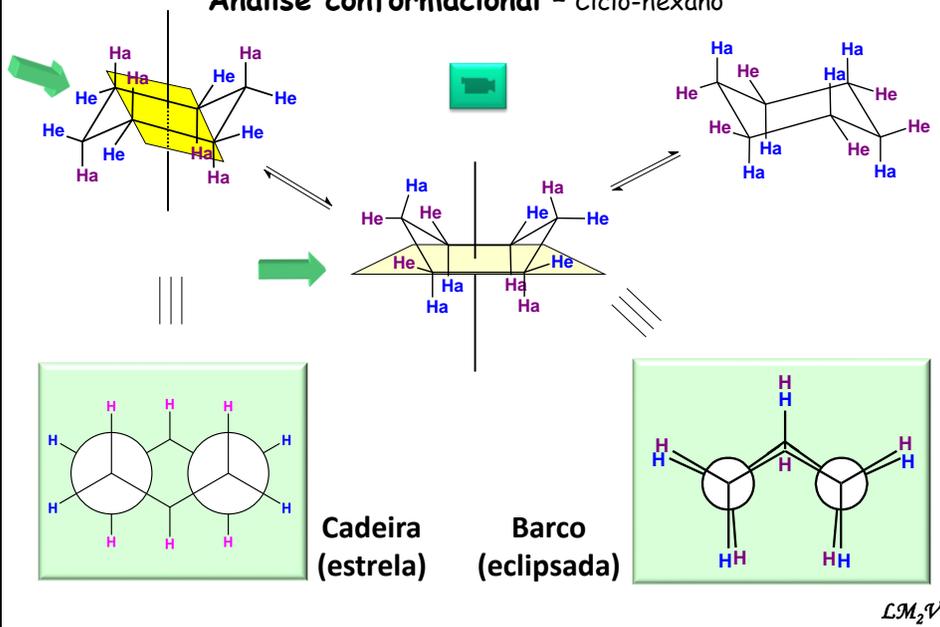
**Confórmeros não planares para
minimizar as ligações eclipsadas**

Cicloalcano (CH ₂) _n	n	Tensão de anel (kJ/mol)
Ciclopropano	3	115
Ciclobutano	4	109
Ciclopentano	5	27
Ciclo-hexano	6	0,4
Ciclo-heptano	7	27
Ciclo-octano	8	42

LM₂V

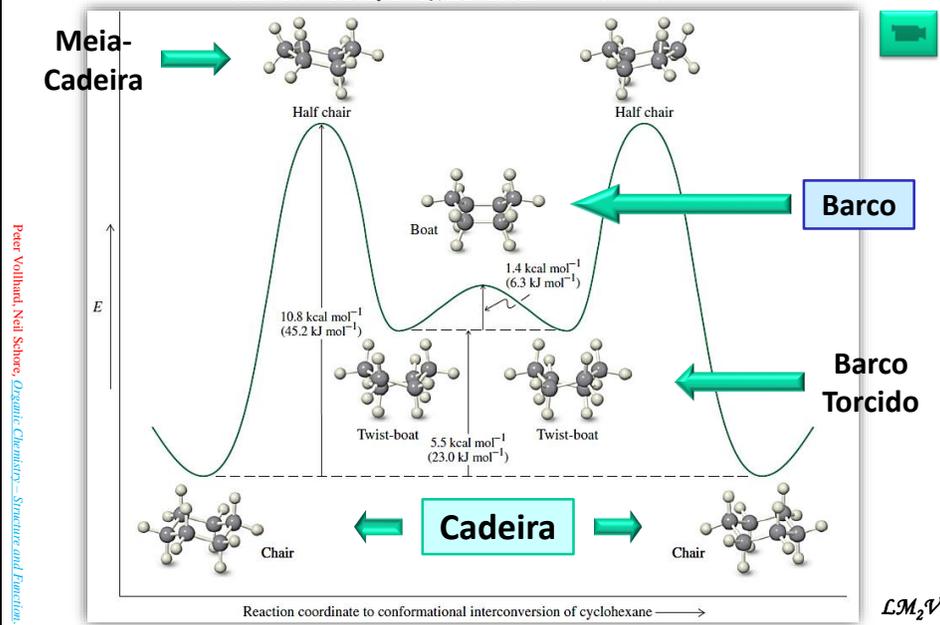
ESTEREOQUÍMICA

Análise conformacional - Ciclo-hexano



ESTEREOQUÍMICA

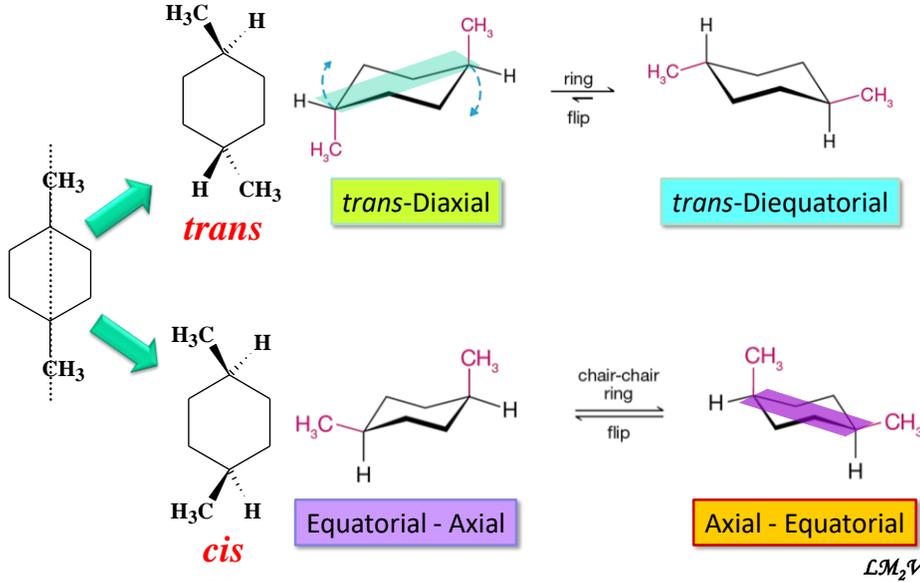
Análise conformacional - Ciclo-hexano



ESTEREOQUÍMICA

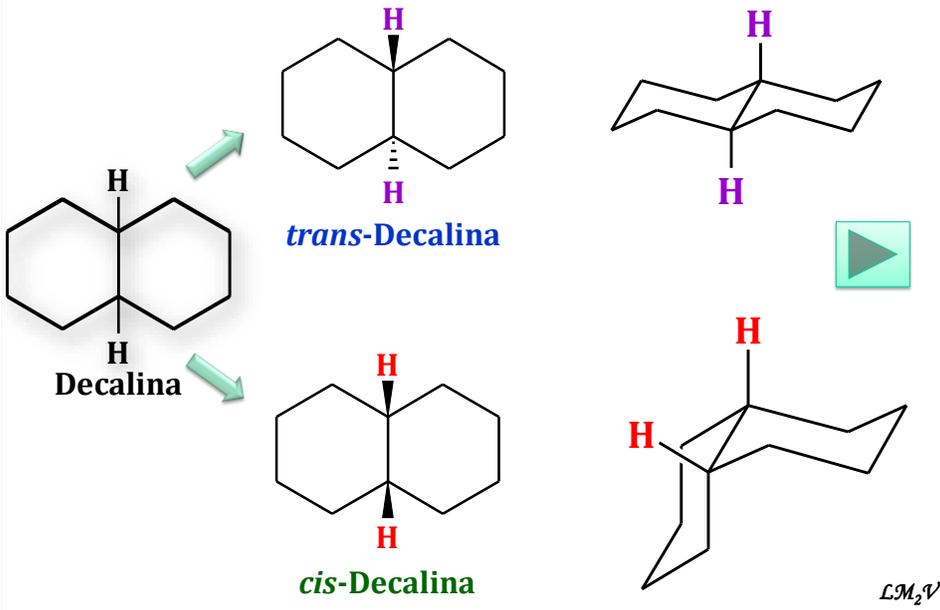
Compostos cíclicos - 1,4-dimetilciclo-hexano

Solomons, Fryhle, Snyder, *Organic Chemistry*



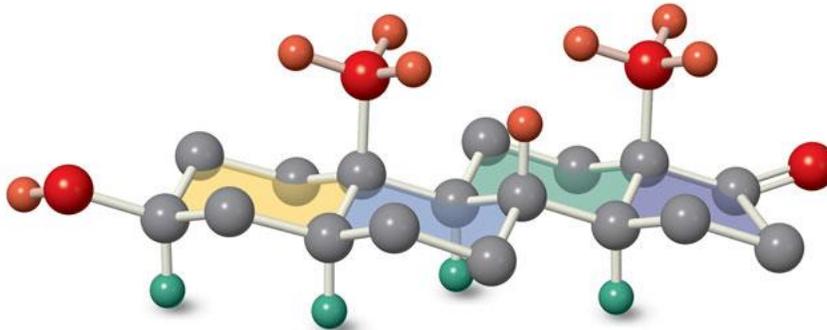
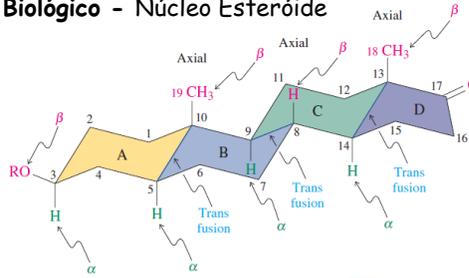
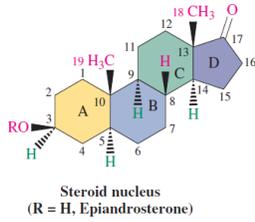
ESTEREOQUÍMICA

Compostos bicíclicos - Decalina



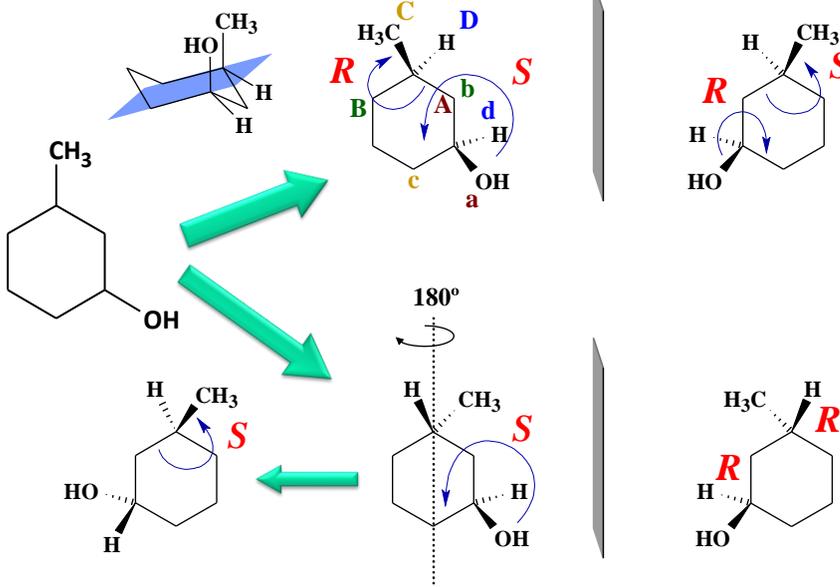
ESTEREOQUÍMICA

Exemplo Biológico - Núcleo Esteróide



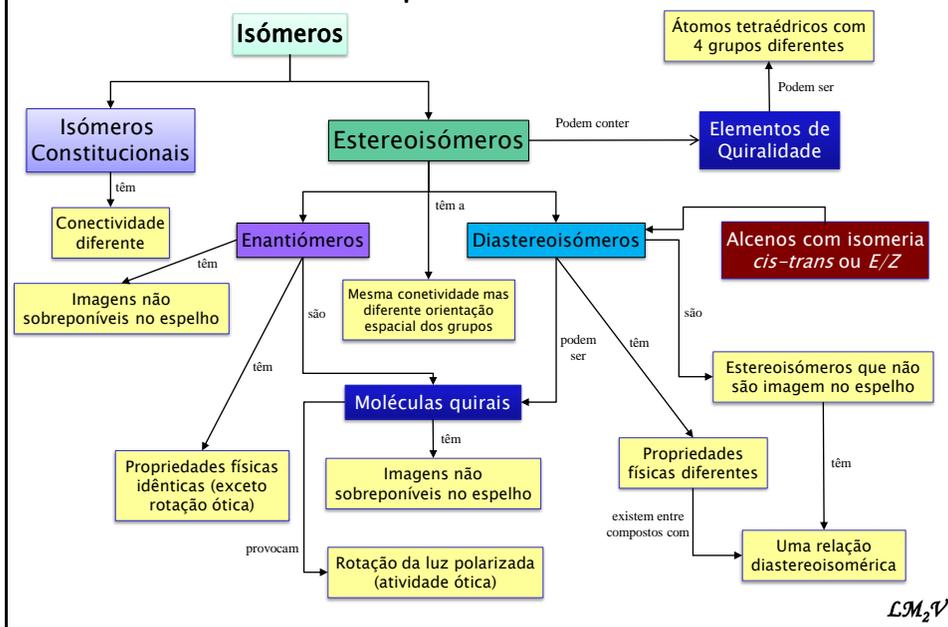
ESTEREOQUÍMICA

Compostos cíclicos - 3-Metilciclo-hexanol



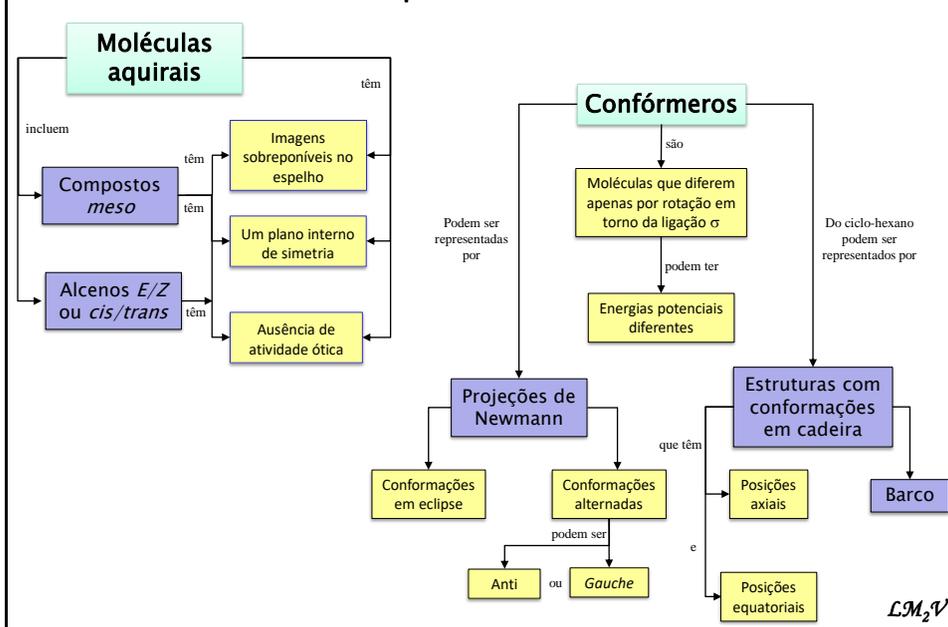
ESTEREOQUÍMICA

Mapa dos conceitos



ESTEREOQUÍMICA

Mapa dos conceitos



Regras de Cahn-Ingold-Prelog

1 – O átomo de maior número atômico tem precedência sobre o de menor.

2 – Quando 2 átomos diretamente ligados ao centro de quiralidade são iguais, comparar os átomos a eles ligados com base nos seus números atômicos. A prioridade é determinada no primeiro ponto de diferença.

3 – Analise para fora a partir do ponto de ligação, comparando todos os átomos ligados a um átomo particular antes de prosseguir ao longo da cadeia.

4 – Analise para fora a partir do ponto de ligação, avaliando os átomos substituintes individualmente, nunca como um grupo.

5 – Considere que um átomo ligado a outro por ligações múltiplas como estando replicado como um substituinte nesse átomo.