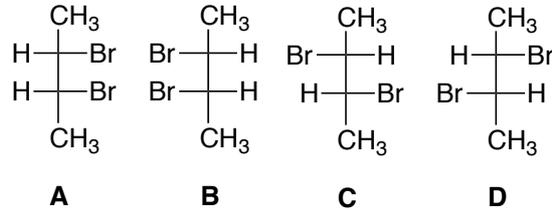


Resolução da lista de exercícios 6- Exercícios sobre Estereoquímica

1. Observando as estruturas de A a D responda:

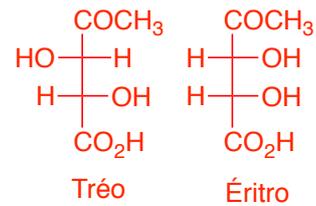
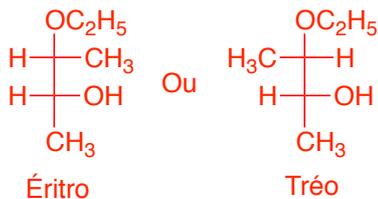
- Uma mistura 1:1 de A e B é opticamente ativa?
- Qual dos compostos é meso, tréo ou éritro?
- Qual a relação entre o par tréo e entre o par éritro-tréo?



- Ambos os compostos A e B são Meso, portanto uma mistura deles é inativa.
- A e B são éritro e ambos são Meso. Os compostos C e D são tréo.
- o par tréo tem relação de enantiômeros. O par éritro-tréo tem relação de diastereoisômeros.

Para uma mistura equimolar ser ativa deveria ser éritro-tréo (diastereoisômeros entre si). Os compostos A e B são ambos meso (e, portanto, o mesmo composto, composto aquiral). Já a mistura C e D (tréo-Tréo) é uma mistura racêmica quando 1:1 (enantiômeros).

2. Faça a Projeção de Fischer para as moléculas abaixo:



3. O $[\alpha]$ específico de uma solução de apenas um enantiômero de 2-cloro-2-feniletano é $-49,2$. Em uma solução com 20% do enantiômero de $[\alpha]$ específico citado e 80% do outro enantiômero, qual o α_{obs} ?

20% de A e 80% de B \rightarrow 20% de A + 20% B leva a mistura racêmica e sobra 60% de B

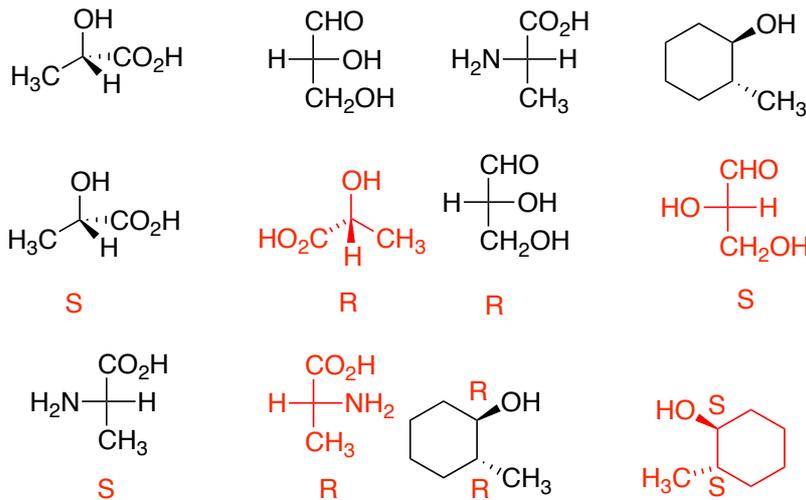
Portanto, tem-se 40% racemato (ou mistura racêmica) e 60% e.e. de B (60% ou 0,6)

Como o α esp. citado na questão é de A, o α esp. de B é +49,2 (mesmo número, mas com sinal contrário). Como o e.e. de B usa-se o α esp. de B.

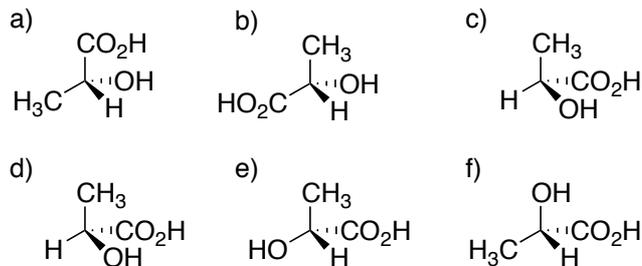
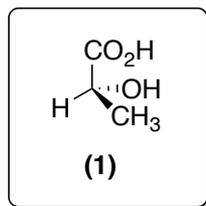
$ee = \alpha / [\alpha] \rightarrow$ pode-se calcular o ee através da rotação observada e específica

$$0,6 = \alpha / +49,2 \rightarrow \alpha = +29,52$$

4. Desenhar a imagem das estruturas abaixo e indicar a Configuração absoluta dos centros.



5. Indicar qual a relação entre a estrutura 1 e as estereorepresentações abaixo:



Composto **1** é S.

Composto **a** é R \rightarrow enantiômeros

Composto **b** é S \rightarrow mesmo composto

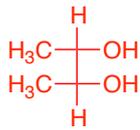
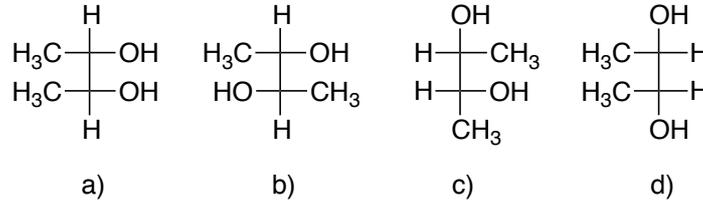
Composto **c** é S \rightarrow mesmo composto

Composto **d** é S \rightarrow mesmo composto

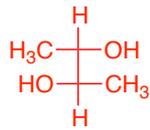
Composto **e** é R \rightarrow enantiômeros

Composto **f** é S \rightarrow mesmo composto

6. Indicar se as estruturas são enantiômeros, diastereoisômeros ou idênticas.

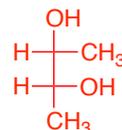


MESO



(2*R*,3*R*)-butano-2,3-diol

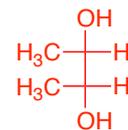
Diastereoisômero de 1 e 4



(2*R*,3*R*)-butano-2,3-diol

Mesmo composto de 2

Diastereoisômero de 1 e 4



(2*R*,3*S*)-butano-2,3-diol

Mesmo composto de 1

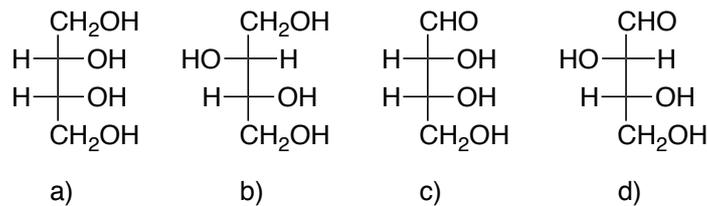
MESO

7. São confôrmeros, diastereoisômeros e ou enantiômeros



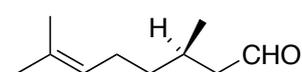
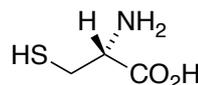
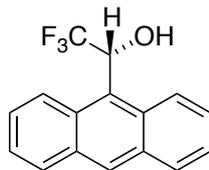
O primeiro é *cis* (ligação de cima somente), centros *S* (OH) e *R* (CH₃). O segundo também é *cis* e os centros são *S* (OH) e *R* (CH₃). Portanto, são o mesmo composto. Sendo o mesmo confôrmero, com o CH₃ axial e o OH em equatorial em ambos.

8. Quais dos compostos abaixo são meso?



O primeiro, *R* e *S* para os centros é Meso. O terceiro composto pode enganar, mas repare que os grupos da ponta são diferentes.

9. Atribua configuração R ou S a cada centro quiral nas moléculas abaixo.



1) *R* 2) *R* 3) *R*

10. Preencher a tabela considerando $l = 1 \text{ dm}$.

Composto	Peso Molecular	α observado	Concentração	α específico
A	-	32,6	0,7 g/mL	+46,57
B	115	-8,33	1 mol/L	-72,5
C	745	-0,016	0,01 mol/L	-2,1
D	127	-1,94	0,56 mol/L	-27,3

(A) $[\alpha] \text{ esp} = \alpha_{\text{obs}} / C \cdot l$

$[\alpha] \text{ esp} = 32,6 / 0,7 \times 1 \rightarrow [\alpha] \text{ esp} = +46,57$

(B) $C = 1 \text{ mol/L} = 115 \text{ g} / 1000 \text{ ml} = 0,115$

$[\alpha] \text{ esp} = \alpha_{\text{obs}} / C \cdot l$

$-72,5 = \alpha_{\text{obs}} / 0,115 \times 1 \rightarrow \alpha_{\text{obs}} = -8,33$

(C) $C = 0,01 \text{ mol/L} = 7,45 \text{ g/L}$

$C = 7,45 \text{ g} / 1000 \text{ mL} = 7,45 \times 10^{-3}$

$[\alpha] \text{ esp} = \alpha_{\text{obs}} / C \cdot l$

$-2,1 = \alpha_{\text{obs}} / 7,45 \times 10^{-3} \times 1 \rightarrow \alpha_{\text{obs}} = -0,016$

(D) $C = 0,56 \text{ mol/L} = 71,12 \text{ g/L} = 71,12 \text{ g} / 1000 \text{ mL} = 0,07112$

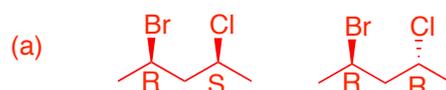
$[\alpha] \text{ esp} = \alpha_{\text{obs}} / C \cdot l$

$-27,3 = \alpha_{\text{obs}} / 0,07112 \times 1 \rightarrow \alpha_{\text{obs}} = -1,94$

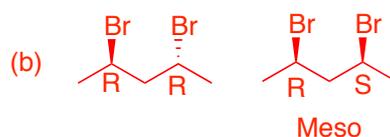
11. Indicar a relação entre as estruturas e representá-las na forma estendida.

a) (2*R*,4*S*)-2-bromo-4-cloropentano e (2*R*,4*R*)-2-bromo-4-cloropentano

b) (2*R*,4*R*)-2,4-dibromopentano e Meso-2,4-dibromopentano



São diastereoisômeros (somente um centro é invertido, não são imagens especulares)



Um é diastereoisômero do outro (meso R/S na mesma molécula, um centro é a imagem do outro com plano de simetria entre os centros).

12. Assumindo que as medidas foram efetuadas em polarímetro com cela de 1 cm:

a) Qual o $[\alpha]$ de uma solução de 0,4 g de 2-butanol em 10 mL de água, sendo que o $\alpha_{\text{obs}} = -0,56$?

b) A sacarose apresenta $[\alpha] = 66,40$. Qual a rotação observada de uma solução contendo 3 g em 10 mL de água?

c) O (*S*)-monosódio glutamato (MSG) puro tem $[\alpha] = +24$. Uma amostra adquirida comercialmente apresentou $\alpha_{\text{obs}} = -16$. Qual a porcentagem de *S* e *R* nesta amostra? Qual o e.e.?

$$a) [\alpha]_{\text{esp}} = \alpha_{\text{obs}} / C \cdot l$$

$$C = 0,4 \text{ g} / 10 \text{ mL} = 0,04 \text{ g/mL}$$

$$[\alpha]_{\text{esp}} = -0,56 / 0,04 \times 1$$

$$[\alpha]_{\text{esp}} = -14$$

$$b) C = 3 \text{ g} / 10 \text{ mL} = 0,3 \text{ g/mL}$$

$$[\alpha]_{\text{esp}} = \alpha_{\text{obs}} / C \cdot l$$

$$66,4 = \alpha_{\text{obs}} / 0,3 \times 1 \rightarrow \alpha_{\text{obs}} = 19,92$$

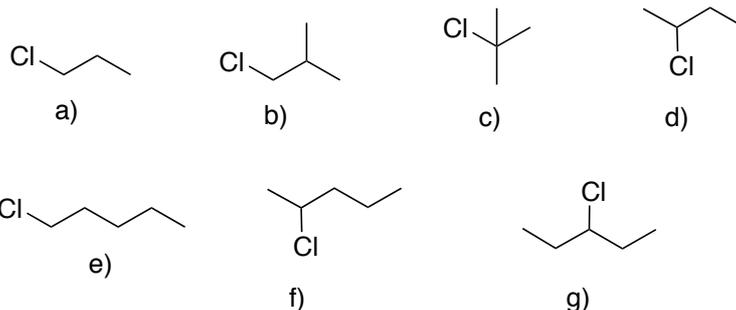
$$c) \text{ e.e.} = \alpha_{\text{obs}} / [\alpha]$$

$$\text{e.e.} = -16 / -24 \rightarrow \text{e.e.} = \mathbf{66\%}$$
 de excesso do enantiômero *R*

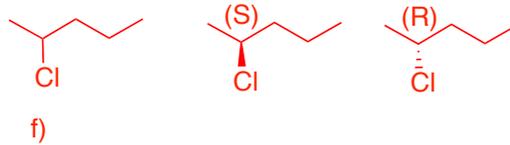
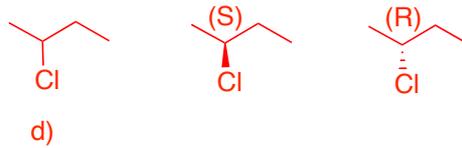
Sobram 34% para ser racemato

Destes 34%, 17% são *R* e 17% são *S*. Portanto existe $66 + 17 = \mathbf{83\% \text{ de } R}$ e $\mathbf{17\% \text{ de } S}$ na amostra comercial.

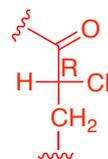
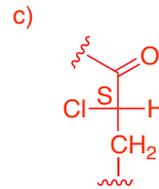
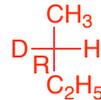
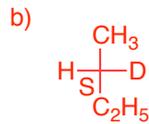
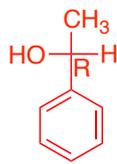
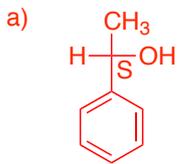
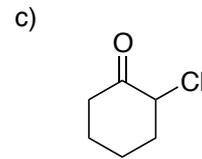
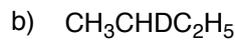
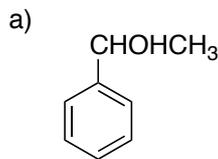
13. Diga se os compostos abaixo são quirais, se forem determine a configuração absoluta de cada centro quiral, desenhando os enantiômeros.



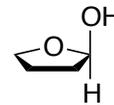
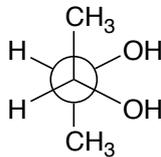
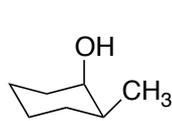
a), b), c), e) e g) aquiral (tem plano de simetria)



14. Faça a projeção de Fischer para as moléculas abaixo:

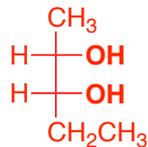
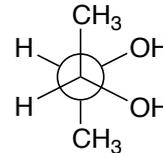
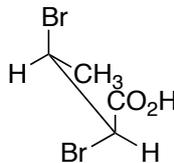
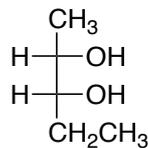


15. Determinar a configuração absoluta dos centros.

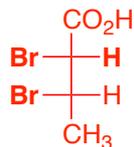


(OH) *R*, (CH₃) *S* *S,S* (transformar em Fischer) *R*

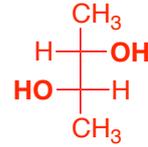
16. Indicar os compostos como eritro ou treo.



Eritro

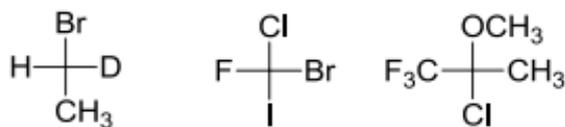


Eritro



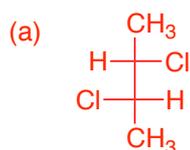
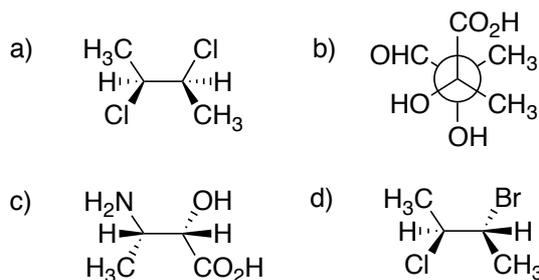
Treo

17. Qual é a configuração absoluta das moléculas abaixo?

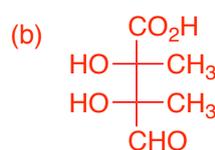


R R R

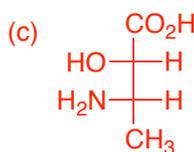
18. Coloque as estruturas que seguem na projeção de Fischer, depois classifique em *R* e *S* cada estereocentro.



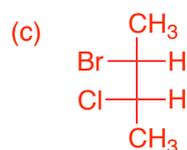
(2*S*,3*S*)-2,3-diclorobutano



Ácido (2*S*,3*R*)-2,3-dihidroxi-2,3-dimetil-4-oxibutanoico

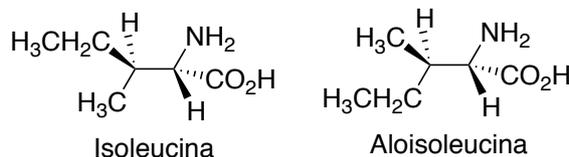


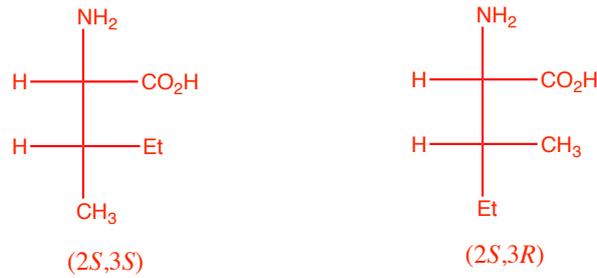
Ácido (2*S*,3*S*)-3-amino-2-hidroxi-butanoico



(2*R*,3*S*)-2-bromo-3-clorobutano

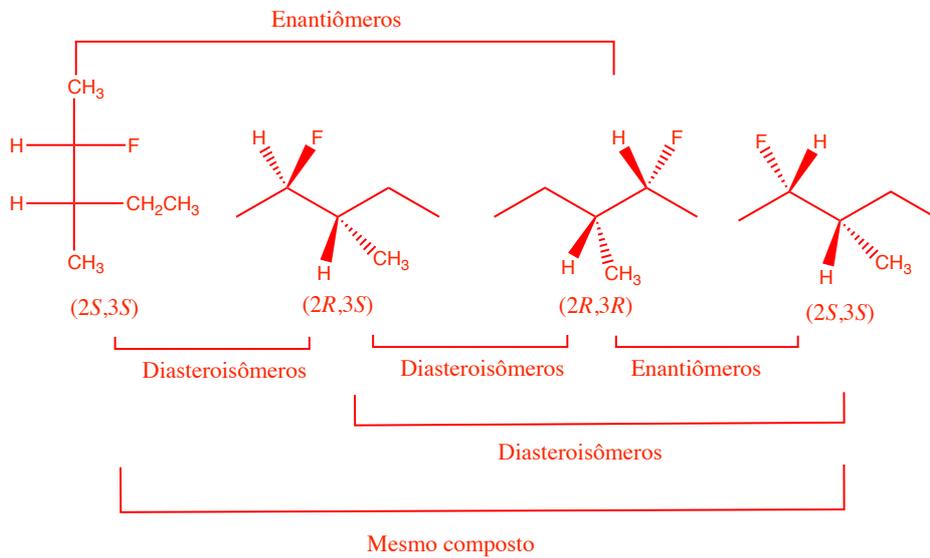
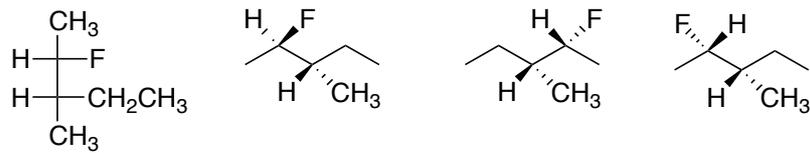
19. Os aminoácidos isoleucina e aloisoleucina estão representados abaixo em suas conformações alternadas. Escreva as projeções de Fischer de cada molécula. Estes compostos são enantiômeros ou diastereoisômeros?





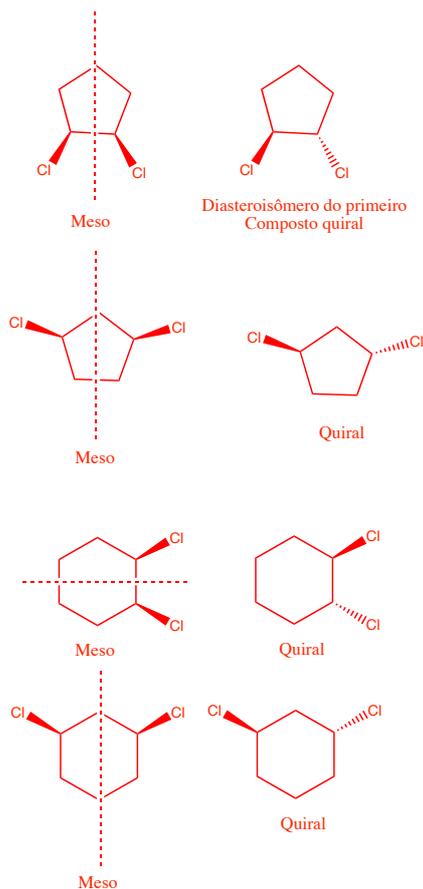
Diastereoisômeros

20. Quais são as relações estereoquímicas (idênticos, enantiômeros ou diastereoisômeros) das quatro moléculas abaixo?

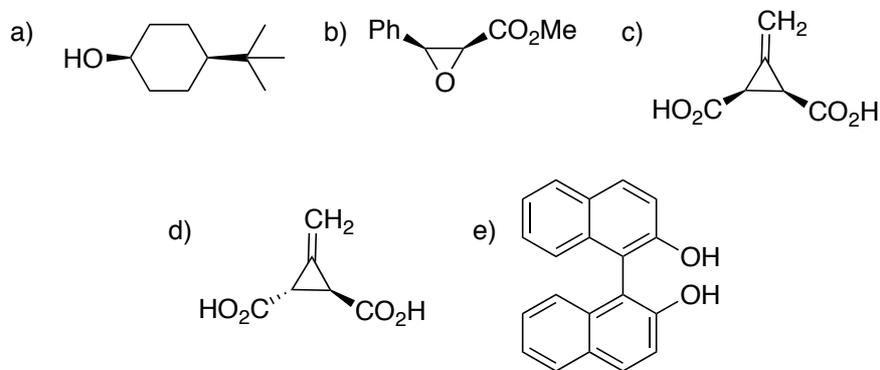


21. Desenhe a estrutura dos compostos abaixo representando o anel na forma planar. Quais são quirais? Quais são meso? Indique a localização do plano de simetria em cada composto meso.

- a) cis-1,2-Diclorociclopentano e seu isômero trans
- b) cis-1,3-Diclorociclopentano e seu isômero trans
- c) cis-1,2-Diclorocicloexano e seu isômero trans
- d) cis-1,3-Diclorocicloexano e seu isômero trans



22. As moléculas abaixo são quirais?



a) Aquiral (plano de simetria cortando a ligação C-OH e C-ter-butila)

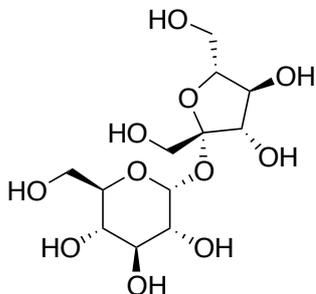
b) Quiral (sem plano de simetria)

c) Aquiral (com plano de simetria cortando o ciclo no meio)

d) Quiral (sem plano de simetria)

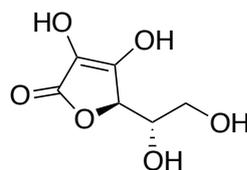
e) Quiral

23. Muitos compostos são encontrados na natureza como um único estereoisômero embora apresentem muitos estereocentros. Indique quantos estereocentros estão presentes em cada um dos seguintes produtos naturais e calcule quantos estereoisômeros são possíveis.



Sacarose

9 estereocentros ($2^9 = 512$ estereoisômeros)
estereoisômeros)



Ácido ascórbico (vitamina C)

2 estereocentros ($2^2 = 4$