

Nova Abordagem para Determinação da Configuração Absoluta em Compostos Orgânicos

Vitor P. Carvalho* (IC), Cid L. C. de Medeiros (IC), Roberto C. Fernandes (IC), Angélica F. S. Barreto (IC), Elayne S. Sampaio (IC) e Luiz A. S. Romeiro (PQ) E-mail: vitorquimica@yahoo.com.br

Grupo de Pesquisa em Ensino de Química - GPEQ, Curso de Química, Centro de Ciências da Educação e Humanidades, Universidade Católica de Brasília, QS 07 lote 1, EPCT, Águas Claras, Taguatinga – DF, 72966-700

Palavras Chave: configuração absoluta, projeções de Newman, estudo metodológico

Introdução

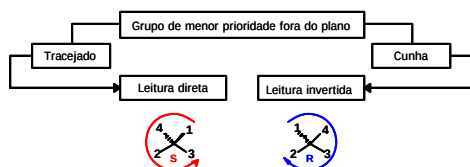
A configuração absoluta (CA) de uma molécula quiral está relacionada à estrutura tridimensional exata dos átomos ligados ao seu centro estereogênico, podendo ser representada por projeções de Fischer. A CA é especificada pela convenção do sistema R,S de Cahn-Ingold-Prelog, de acordo com a ordem de prioridade estabelecida nos números atômicos e/ou número de massas para isótopos, do grupo de átomos que compõem o centro de quiralidade, posicionando o grupo de menor prioridade (GMP) para trás, afastando-se do leitor, no momento da leitura.

A determinação da CA quando o GMP está nas ligações fora do plano, tanto na cunha (aproximando do observador - leitura invertida) quanto no tracejado (distanciando do observador - leitura direta) já está bem estabelecida na literatura. Entretanto, a determinação da CA quando o GMP está nas ligações no plano é feita através de trocas entre os grupos, até que o GMP esteja orientado para trás (geralmente na posição tracejada).

Descrevemos neste trabalho um novo método para determinação da CA em compostos orgânicos, bem como a transposição dos elementos de quiralidade para projeções de Fischer e de Newman.

Resultados e Discussão

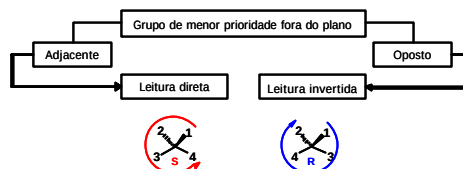
Este estudo metodológico foi baseado no reconhecimento de padrões de leitura da CA, obtidos pela variação da posição do GMP com relação à ligação do tipo *cunha*. A linguagem utilizada no estabelecimento da metodologia foi baseada na existência de duas ligações no plano do papel (plano) e duas outras fora do plano do papel (cunha e tracejada) para estruturas tridimensionais em linha com geometria tetraédrica.



A transposição dos elementos de quiralidade da estrutura em linha para as projeções de Fischer e Newman obedeceu aos critérios cotidianos

subliminares de sentido e direção i.e. direita-para cima; esquerda-para baixo bem como a formas geométricas de letras do alfabeto latino i.e. U e N.

A análise dos padrões de GMP no plano com relação à *cunha* estabeleceu que : 1) quando o GMP estiver do mesmo lado da cunha (adjacente) a leitura da CA deverá ser direta; 2) quando o GMP estiver do lado oposto da cunha a leitura da CA deverá ser invertida.



Considerando a transposição dos elementos de quiralidade para a projeção de Fischer (PF), a estrutura em linha deve ser desenhada na projeção cavalete, conformação eclipsada, de modo que o desenho seja semelhante à letra U do alfabeto latino. Neste sentido, os grupos que estiverem no plano ocuparão a linha vertical: o grupo à esquerda deverá permanecer para baixo e o da direita para cima; enquanto que os grupo que estiverem fora do plano ocuparão a linha horizontal: a cunha à esquerda e o tracejado à direita.

Os mesmos critérios foram adotados para as projeções de Newman (PN), onde a PF correspondeu a uma PN do tipo eclipsada, enquanto que a adoção da estrutura em linha do tipo zig-zag, semelhante à letra N, levou a uma PN tipo alternada, com os mesmos critérios estabelecidos para os grupos no plano e fora dele.

Conclusões

A metodologia mostrou-se eficiente para determinação da CA em moléculas tridimensionais bem como quanto à transposição de quiralidade para as projeções de Fischer e de Newman. Acreditamos que a determinação rápida e eficiente da CA, ajudará no desenvolvimento da capacidade de abstração dos estudantes de estereoquímica.

Agradecimentos

Os autores agradecem à UCB pelo apoio financeiro.

¹ McMurry, J.; Química Orgânica. 6ª edição – São Paulo: Thomson Learning, **2005**