

Conservação da Configuração Absoluta na Transposição para Projeções de Newman e Fischer: Um Estudo Metodológico

Roberto C. Fernandes* (IC), Vitor P. Carvalho (IC), Cid L. C. de Medeiros (IC), Angélica F. S. Barreto (IC), Elayne S. Sampaio (IC) e Luiz A. S. Romeiro (PQ) E-mail: romeiro@ucb.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 e Fischer, estudo metodológico

Introdução

Os aspectos estereoquímicos apresentam papel determinante no fenômeno de reconhecimento molecular de fármacos e seus alvos biológicos. Uma das dificuldades encontradas entre os estudantes de estereoquímica é a visualização tridimensional das moléculas na perspectiva bidimensional do papel ou do quadro-negro. A abordagem utilizada na literatura para a transposição da configuração absoluta (TCA) em compostos orgânicos quirais para projeções de Fischer (PF) ou de Newman (PN) não satisfaz a exploração do tema tanto pelo educador quanto pelo educando. Descrevemos um método simples para auxiliar no envolvimento, exploração e aprendizagem deste fascinante tema.

Metodologia

A TCA de estruturas em linha para as PF e PN obedeceu aos critérios 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**, **V** e **N**. Na obtenção das PF bem como PN eclipsada a estrutura em linha deve adotar a projeção cavalete semelhante à letra **U**. Os grupos no plano ocuparão a linha vertical: o grupo à esquerda para baixo e o da direita para cima. Os grupos fora do plano ocuparão a linha horizontal: a cunha à esquerda e o tracejado à direita. Para obtenção da PN alternada a estrutura deve adotar a projeção cavalete semelhante à letra **N**, seguindo os critérios já estabelecidos para os grupos.

Resultados e Discussão

O estudo metodológico referente a TCA para PF foi realizado com estruturas contendo de 1 a 4 centros quirais (CQ). Quando há apenas um CQ deve-se adotar a letra **U**. Uma vez que as PF são conformações eclipsadas, a adoção da letra **U** facilita a cognição com esta exigência metodológica. A forma da letra **U** é apropriada para estruturas com 2 CQ, onde os vértices e extremidades constituem um total de 4 carbonos. Quando houver mais de 2 CQ, os carbonos devem ser sinalizados na base da letra **U** como nós em uma corda (Figura 1). O uso da letra **N** para PF é metodologicamente incorreto levando a diastereoisômeros da estrutura original.

Considerando a construção das PN, as estruturas em forma de **N** (antiperiplanar, sinclinal) levam a PN alternadas, enquanto em forma de **U** (sinperiplanar, anticlinal) eclipsadas, ambas apresentando o grupo frontal apontando para o norte ou para cima. A inversão das formas (**U** e **n** para PF e **?** e **n** para a PN) levam ao enantiômero do CQ estabelecido na estrutura original em forma de **U**, **U** ou **N**, necessitando a inversão nos critérios da TCA: o grupo frontal aponta para o sul ou para baixo bem como na conformação antiperiplanar: os grupos no plano, à direita para baixo e o da esquerda para cima de acordo com a letra invertida.

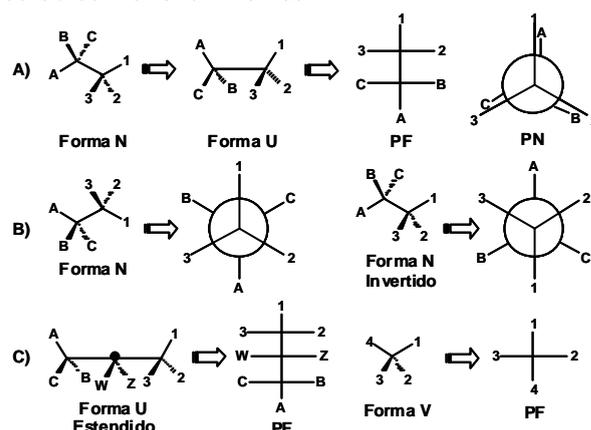


Figura 1 – A) Conversão de estrutura N para forma em U e transposição para PF e PN; B) transposição de estruturas N e N invertido para respectivas PN; C) Transposição de 3 CQ e 1 CQ para PF.

Conclusões

A metodologia foi avaliada em turmas de Química Orgânica da UCB e UNB mostrando-se de fácil assimilação e eficiente no auxílio cognitivo deste saber específico. A avaliação do método junto a alunos do Ensino Médio, visando à integração deste conteúdo para futuros ingressos nos cursos das áreas de Ciências Exatas e da Vida, constitui a perspectiva deste trabalho.

Agradecimentos

Os autores agradecem à UCB pelo apoio financeiro.

¹ Eliel, L. E., Wilen, S. H., Mander, L. N.; Stereochemistry of Organic Compounds. 1st ed. – New York: Wiley-Interscience, 1994.