



Coordenação de Armindo Rodrigues

## Isómeros: compostos iguais com diferenças

Autora:

Ana M. L. Seca

Em 1831, o prestigiado químico Jacob Berzelius introduziu o conceito de isómeros: Compostos que possuem os mesmos átomos nas mesmas proporções, mas em que esses átomos se ligam uns aos outros de diferentes formas (diferentes arranjos entre eles). O exemplo discutido à época foi o ácido fulmínico ( $\text{H-C}\equiv\text{N-O}$ ) (saís deste ácido são usados como detonadores primários) e o ácido cianico ( $\text{H-O-C}\equiv\text{N}$ ) (líquido incolor e venenoso).

O conceito de isomeria permanece como essencial em química tendo ao longo dos anos sido aprofundado e alargado, sendo possível encontrar na natureza e no laboratório um largo conjunto de exemplos de compostos isómeros com propriedades e aplicações práticas muito distintas.

O álcool etílico, cujo nome segundo as regras internacionais da nomenclatura química é etanol, possui a fórmula química  $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$ , e a fórmula estrutural apresentada na figura 1 A. É um líquido à temperatura ambiente, entra em ebulição a  $78,25^\circ\text{C}$ , forma-se por exemplo durante a fermentação de açúcares e 1 mL deste líquido tem a massa de 0,789 g (densidade 0,789). O éter metílico (nome químico éter dimetílico), é um isómero do etanol pois possui exatamente a mesma fórmula química, mas sua fórmula estrutural é dife-

rente (ver figura 1 B). Como consequência dessa diferença estrutural, o éter metílico é um composto muito menos polar que o etanol (e por isso menos solúvel em água), tem o ponto de ebulição a  $-23^\circ\text{C}$  (é um gás à temperatura ambiente) e é ainda menos denso do que o etanol. A este tipo de isómeros dá-se o nome de isómeros funcionais pois cada composto possui o grupo funcional característico de uma família de compostos orgânicos específica, C-OH característico dos álcoois e C-O-C característico dos éteres (assinalados a vermelho nas figuras 1 A e 1 B, respetivamente).

Mas existem outros tipos de isómeros. Por exemplo, o ácido octadec-9-enóico é um ácido gordo com a fórmula química  $\text{C}_{18}\text{H}_{34}\text{O}_2$ , e que possui uma ligação dupla localizada entre o nono e o décimo carbonos a contar do último da cadeia, e por isso, é classificado como ácido gordo insaturado  $\omega$ -9. A existência desta ligação dupla que não exhibe rotação livre, ou seja, é "rígida", implica que podem existir 2 arranjos possíveis, isto é, 2 isómeros.

O isómero indicado na figura 1 C em que os hidrogénios dos carbonos da ligação dupla (assinalados a rosa) estão para o mesmo lado, designado por isómero *cis*. Neste caso o composto é o ácido *cis*-octadec-9-enóico (fórmula estru-

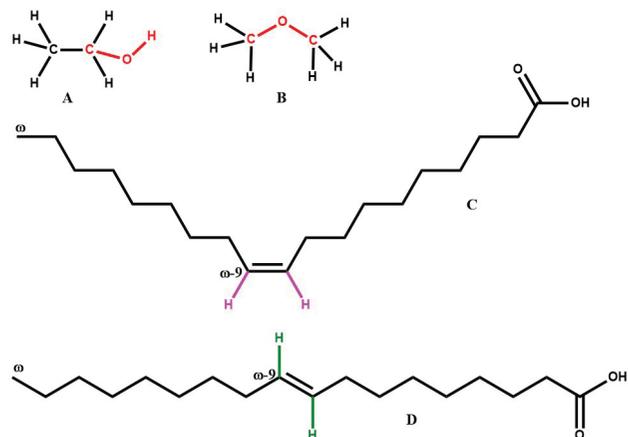


Figura 1: Fórmula estrutural do etanol (A), do éter metílico (B), do ácido oleico (C) e do ácido elaidico (D)

Coordenação de Armindo Rodrigues

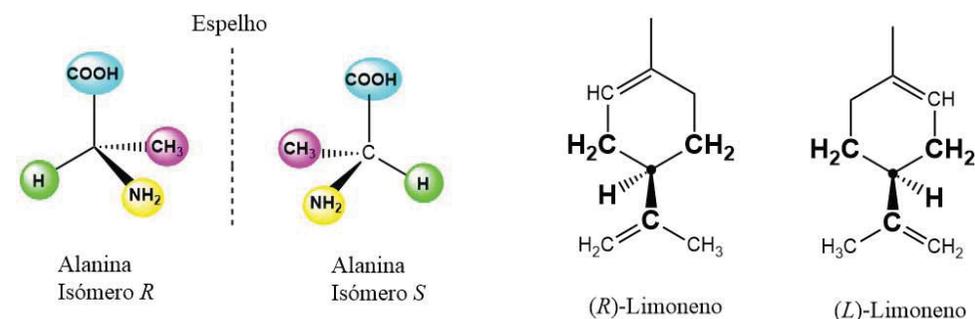


Figura 2: Estrutura dos 2 isómeros possíveis para o aminoácido alanina e para o monoterpene limoneno

tural na figura 1 C), sendo mais comumente designado por ácido oleico ou C18:1 *cis*-9 e a sua longa cadeia de carbonos apresenta uma forma curva. Ele ocorre naturalmente em vegetais e peixes, e é muito abundante em vários óleos vegetais tais como azeite, óleo de amendoim e girassol. O consumo de ácido oleico é associado a vários efeitos benéficos para saúde entre eles a redução da tensão arterial e a diminuição de LDL (conhecido como "colesterol mau"). Por seu lado, o outro isómero, designado por isómero *trans*, possui os hidrogénios dos carbonos da ligação dupla para lados opostos (assinalados a verde na figura 1 D), e a cadeia do ácido gordo tem uma forma em "linha reta". Trata-se do ácido elaidico, quimicamente semelhante em tudo ao ácido oleico exceto na configuração da ligação dupla. São os chamados isómeros configuracionais ou isómeros *cis-trans* (na nomenclatura mais antiga designados por isómeros geométricos). No entanto, as semelhanças ficam por aqui. O ácido elaidico é muito mais raro na natureza, mas é um dos produtos do processo industrial de hidrogenação parcial de gorduras vegetais, estando o seu consu-

mo associado ao aumento de doenças cardiovasculares. Existem outros tipos de isomerismo cujas diferenças na fórmula estrutural são ainda mais subtis, enquanto as diferenças nas propriedades exibidas são evidentes. Vejamos, por exemplo, os compostos isómeros que estão um para o outro como a nossa mão direita está para a nossa mão esquerda: são em tudo iguais, exceto não serem sobreponíveis e serem a imagem um do outro num espelho. É o que acontece em qualquer composto que possua pelo menos um carbono ligado a 4 grupos substituintes diferentes, chamado carbono quiral. O aminoácido alanina é um desses casos (figura 2), e é extraordinário que, embora possam existir os 2 isómeros, a síntese de proteínas inclui apenas o isómero S (mais conhecido por L-alanina). O limoneno é um composto natural responsável pelo aroma típico dos citrinos e possui um carbono quiral, ou seja, tem 2 isómeros possíveis. Na laranja existe maioritariamente o isómero R (figura 2) enquanto no limão o isómero S é maioritário (figura 2) sendo esta diferença a responsável pelo distinto aroma destes 2 frutos.



## Isómeros com efeitos muito distintos

A talidomida é um medicamento com efeitos sedativos que na década de 60 era receitado a grávidas para combater os enjoos matinais. Daqui resultou um elevado número de bebés nascidos com malformações em braços e pernas (focomelia), os "bebés talidomida". De facto, existem 2 isómeros deste com-

posto, R e S, que em condições fisiológicas se interconvertem, sendo o isómero R o responsável pelos efeitos sedativos, enquanto o isómero S se liga à enzima cereblon, interveniente no processo de formação dos membros em fetos, inativando-a e causando o efeito teratogénico.