



QUÍMICA ORGANICA I

Florencia Grasso
fgrasso@agro.unc.edu.ar

Isomería



Isomería

Fenómeno que presentan ciertos compuestos llamados isómeros consistente en poseer la misma fórmula molecular pero propiedades físicas y químicas distintas, debido a la distinta disposición de los átomos o grupos de átomos dentro de la molécula.

Isomería



Isomería
estructural

Compuestos con igual fórmula molecular, pero distinta estructura

Isomería
conformacional

Compuestos con igual fórmula molecular, igual estructura, igual configuración, pero distinta conformación

Estereoisomería

Compuestos con igual fórmula molecular, igual estructura, pero distinta configuración

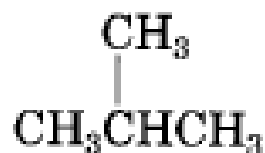
Isomería estructural



- ❑ **Isomería estructural de cadena:** igual FM y distinta cadena (forma del esqueleto carbonado).
- ❑ **Isomería estructura de función:** igual FM y diferente grupo funcional.
- ❑ **Isomería estructural de posición:** igual FM, igual grupo funcional y diferente posición del GF en la cadena.

Isomería estructural

Distintos esqueletos
de carbono



y



2-metilpropano
(isobutano)

Butano

Diversos grupos
funcionales



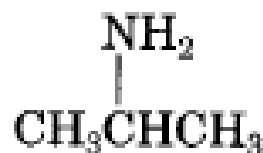
y



Alcohol etílico

Éter dimetílico

Posición diferente
de los grupos
funcionales



y



Isopropil amina

Propilamina

Isomería estructural

Distinta
estructura



Distinto orden
de enlace



- Distintos esqueletos
- Distintos grupos funcionales
- Distintos puntos de unión

Distintas propiedades físicas
y químicas

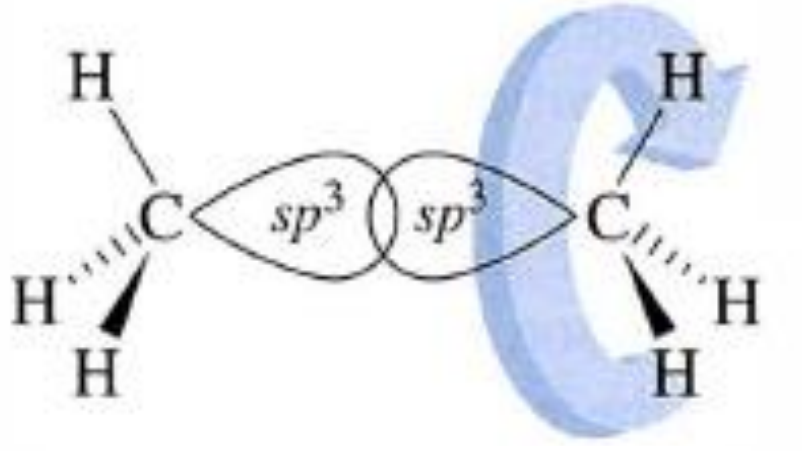
Isomería estructural

Tipo de isomería	Nombre	Punto de fusión	Punto de ebullición
Isómeros de cadena	metilpropano	-160 °C	-11,7 °C
	n-butano	-140 °C	-1 °C
Isómeros de función	etanol	-114 °C	78 °C
	éter dimetílico	-24 °C	0,5 °C
Isómeros de posición	isopropilamina	-95 °C	34 °C
	propilamina	-83 °C	48 °C

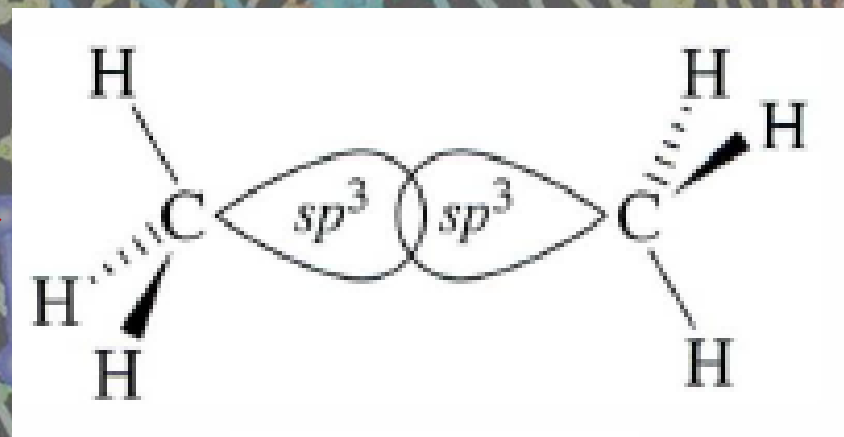
Isomería estructural

Tipo de isomería	Nombre	Propiedades químicas
Isómeros de cadena	metilpropano	$\Delta H_{\text{comb}} = -2878 \text{ KJ7mol}$
	n-butano	$\Delta H_{\text{comb}} = -2870 \text{ KJ7mol}$
Isómeros de función	etanol	$\text{pK}_a = 15,9$
	éter dimetílico	Disuelve en H_2SO_4
Isómeros de posición	isopropilamina	$\text{pK}_b = 3,32$
	propilamina	$\text{pK}_b = 3,40$

Isomería conformacional

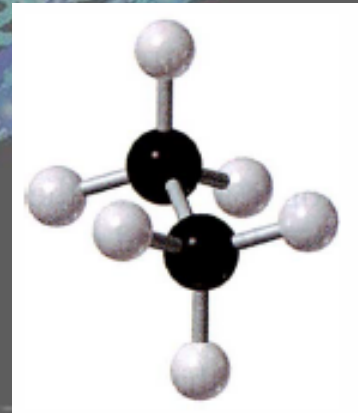
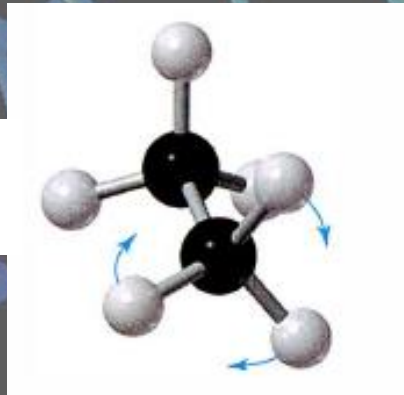


rotación en
torno al eje del
solapamiento



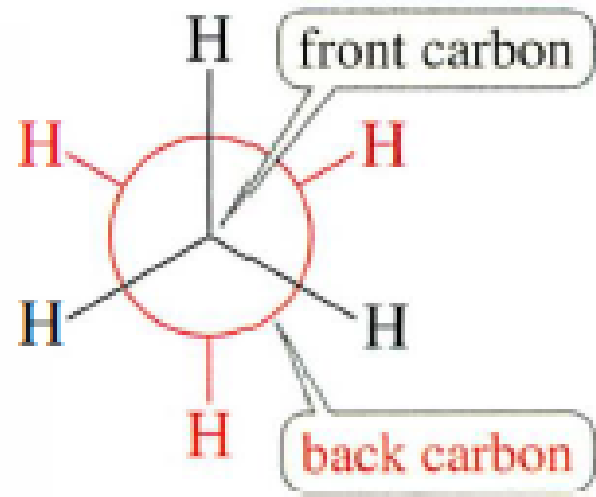
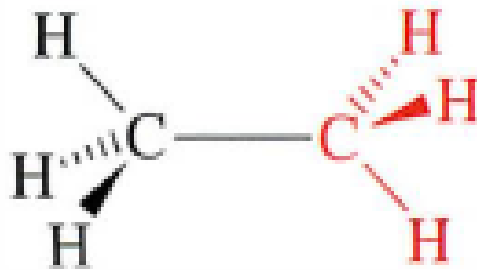
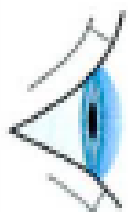
se mantiene el
solapamiento

Conformación
eclipsada



Conformación
anti

Isomería conformacional

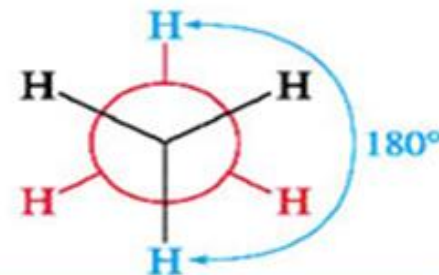
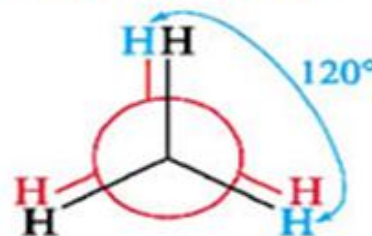
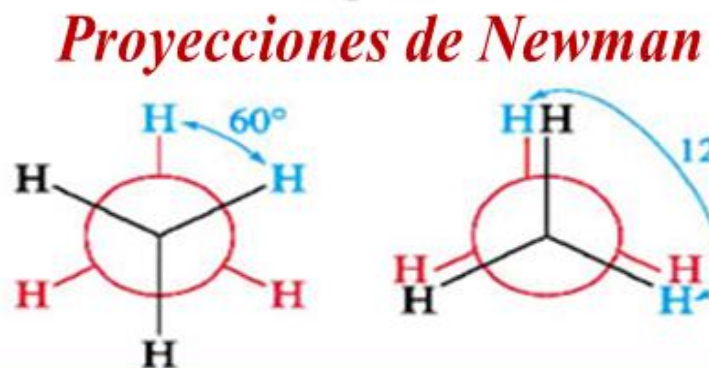
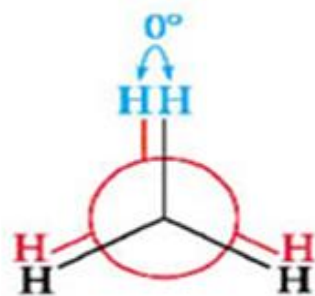
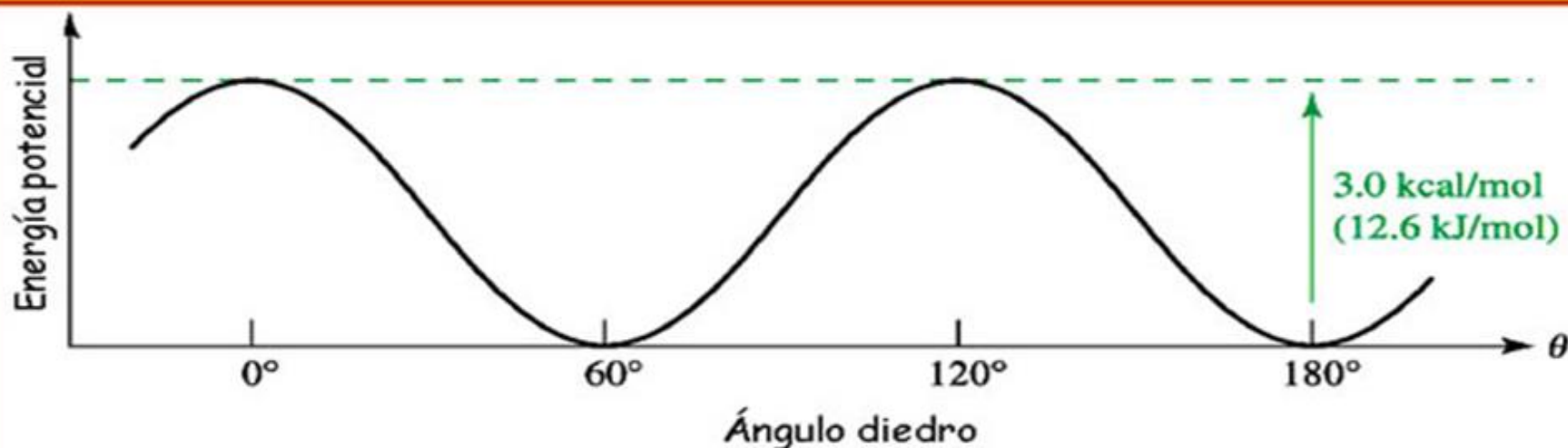


Dibujo en perspectiva

Proyección de Newman

Isomería conformacional

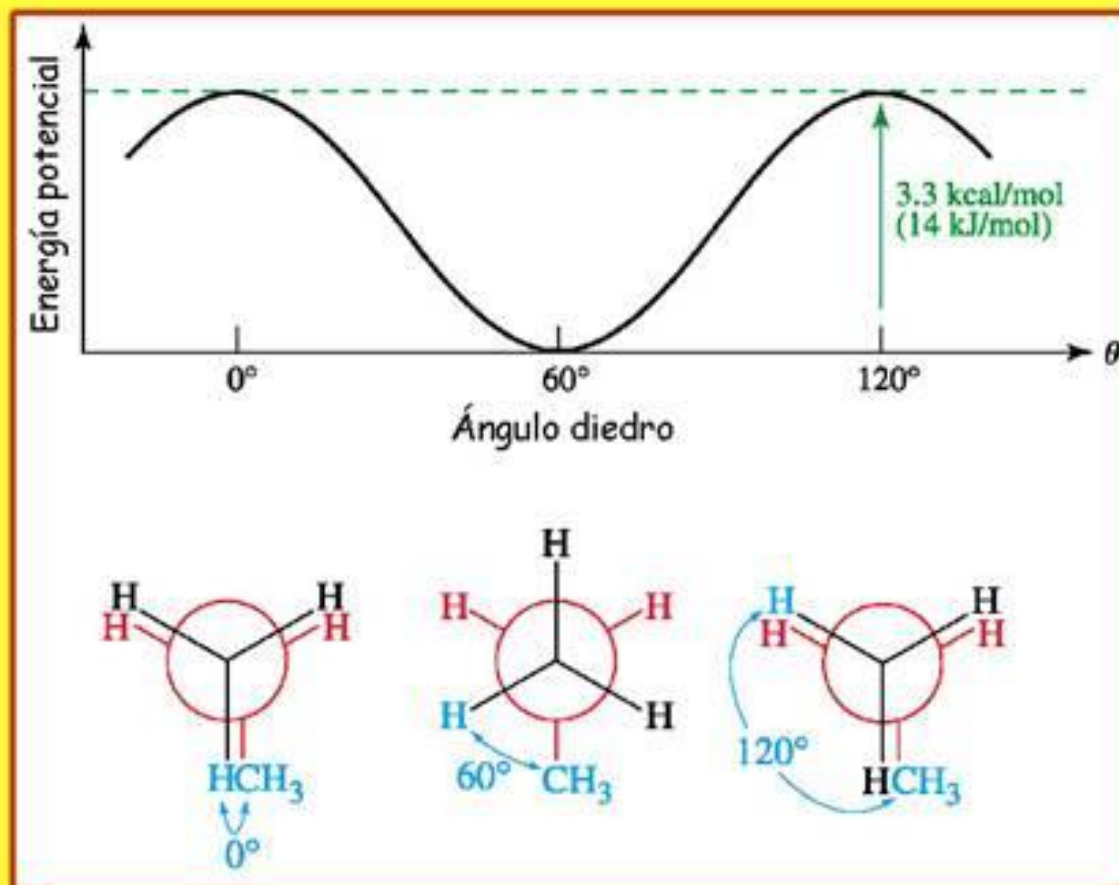
Etano. Análisis conformacional



Isomería conformacional

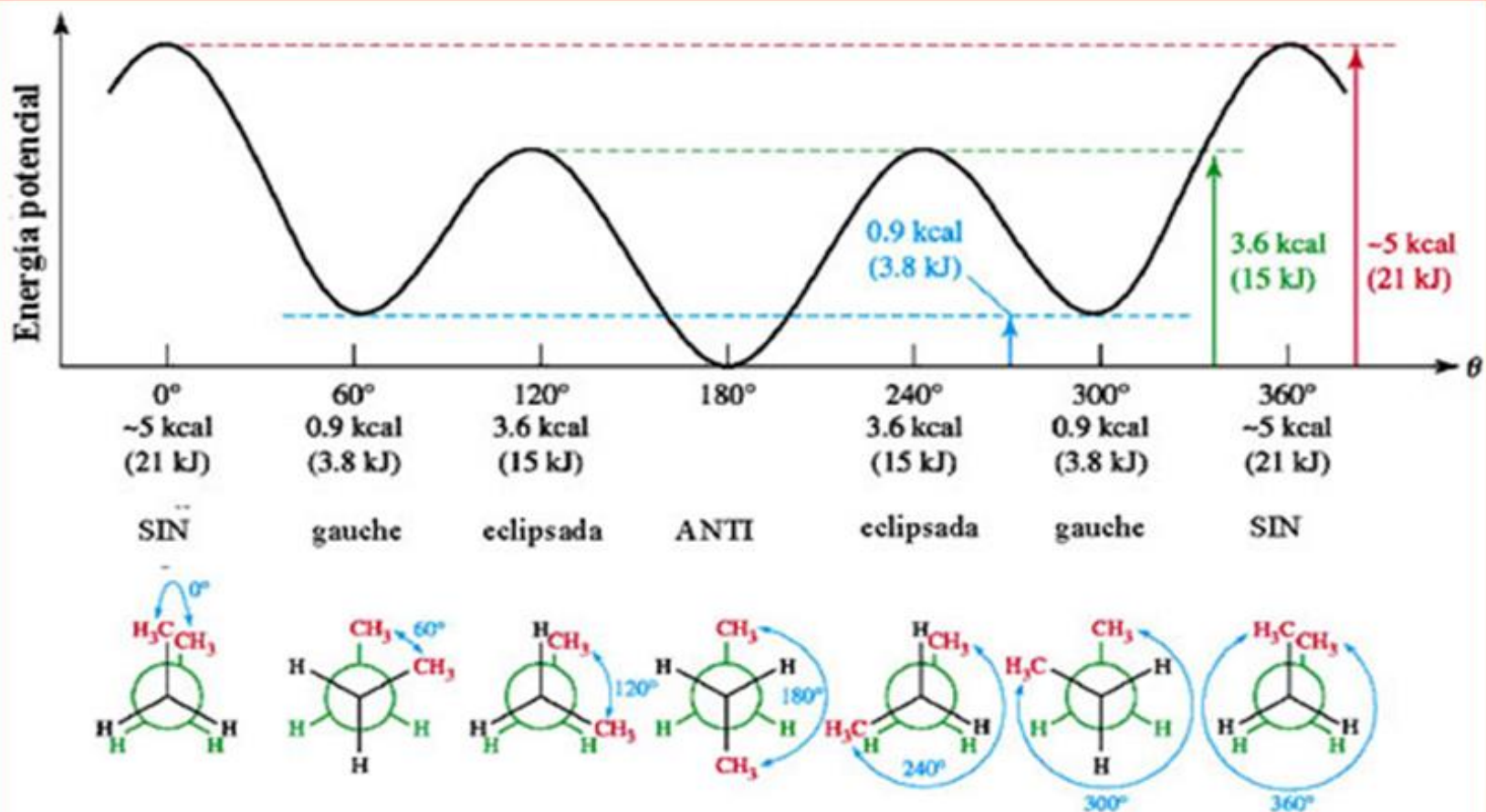
Figura 4.3.

Propano. Análisis conformacional

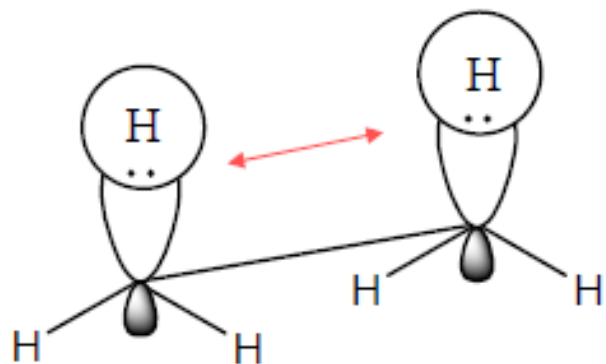


Isomería conformacional

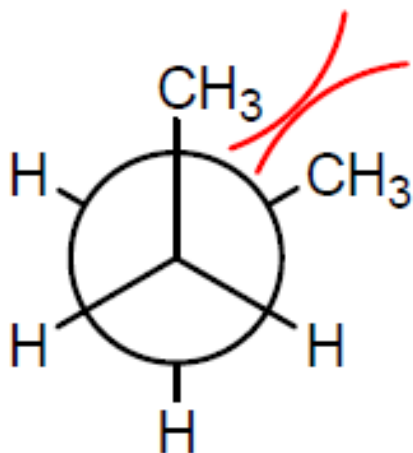
Butano. Análisis conformacional



Isomería conformacional



Tensión torsional se debe a la repulsión de los pares de electrones σ de enlaces que están eclipsados



Tensión estérica se debe a las fuerzas de Van der Waals repulsivas que se dan entre átomos que se ven forzados a acercarse más de lo que permiten sus radios atómicos

Isomería conformacional

Interacción	Causa	Energía (kcal/mol)
H-H eclipsada	Tensión torsional	1
H-CH ₃ eclipsada	Principalmente tensión torsional	1,3
CH ₃ -CH ₃ gauche	Tensión torsional	0,9
CH ₃ -CH ₃ eclipsada	Tensión torsional y tensión estérica	3

Isomería conformacional



CONFORMACIÓN

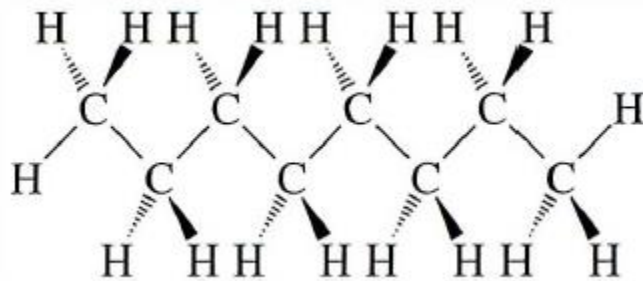
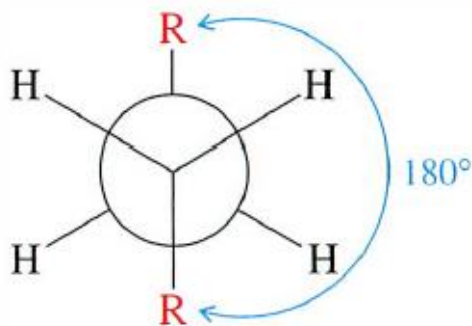
DISPOSICIÓN ESPACIAL QUE SE PRODUCE POR LA ROTACIÓN LIBRE EN TORNO A LOS ENLACES σ

LAS BARRERAS ENERGÉTICAS DEL INTERCAMBIO ENTRE CONFÓRMEROS SON SUPERADAS A TEMPERATURA AMBIENTE

NO SON AISLABLES

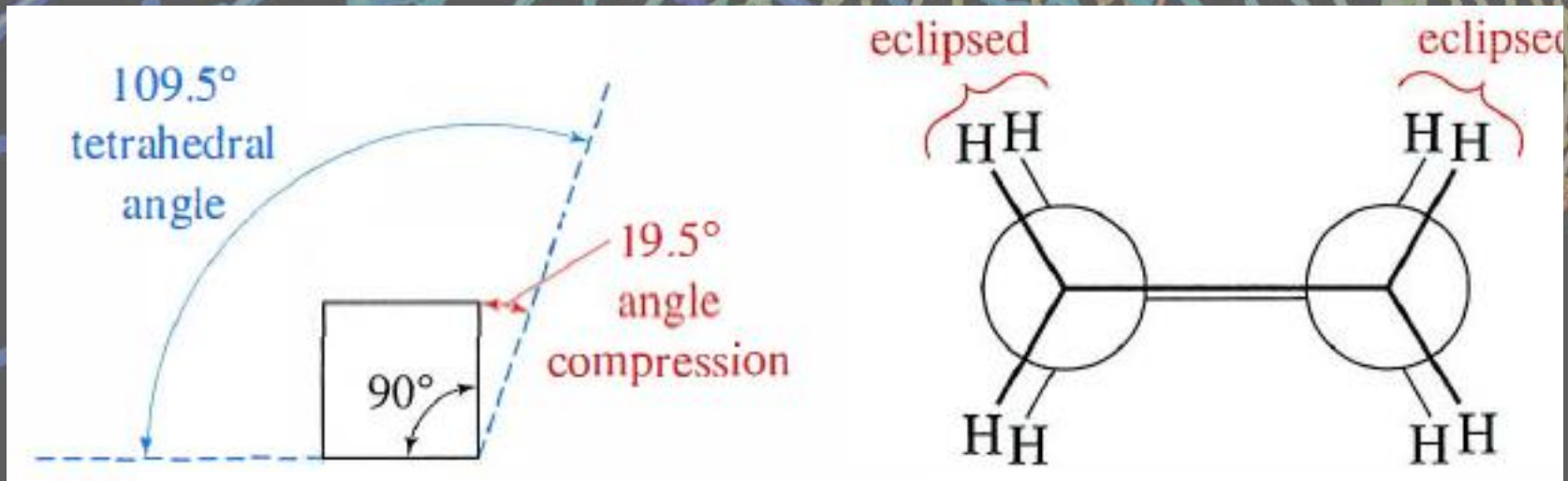
Isomería conformacional

- ❑ Para un alcano superior la conformación más estable será aquella en la que todos los enlaces C-C estén dispuestos de forma alternada y en la que los sustituyentes más voluminosos guarden entre sí una disposición anti.
- ❑ Si la molécula tiene otros grupos distintos de alquilo, hay que considerar además factores polares y la posibilidad de formación de enlaces por puente de hidrógeno al realizar su análisis conformacional.



n-octano
cadena en forma
de zig-zag

Conformación de cicloalcanos



Ciclobutano

Proyección de
Newman del
ciclobutano planar

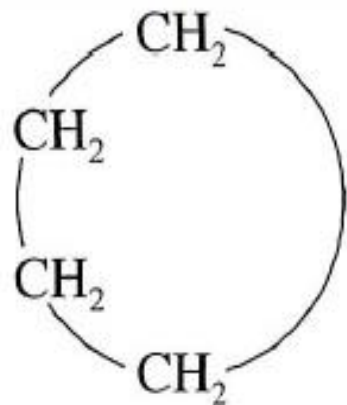
La tensión anular del ciclobutano resulta de dos factores: del ángulo comprimido desde $109,5^\circ$ a 90° (tensión angular o de Baeyer) y de la tensión torsional de los enlaces eclipsados.

Conformación de cicloalcanos

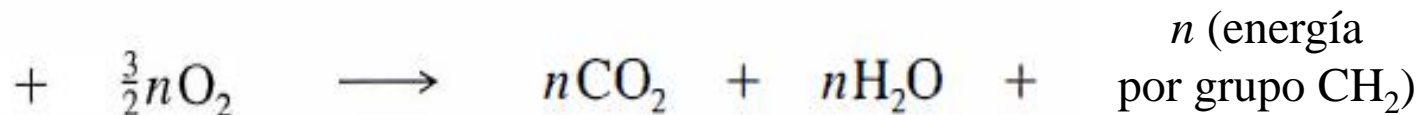
estabilidad



Calores de combustión



cicloalcano

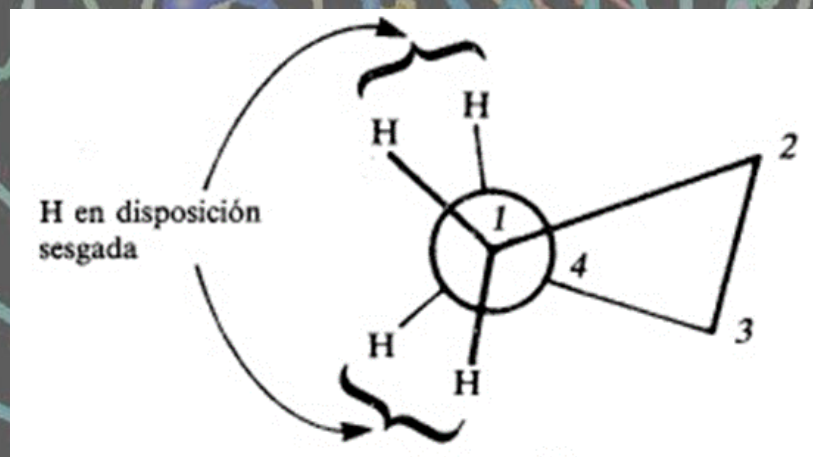
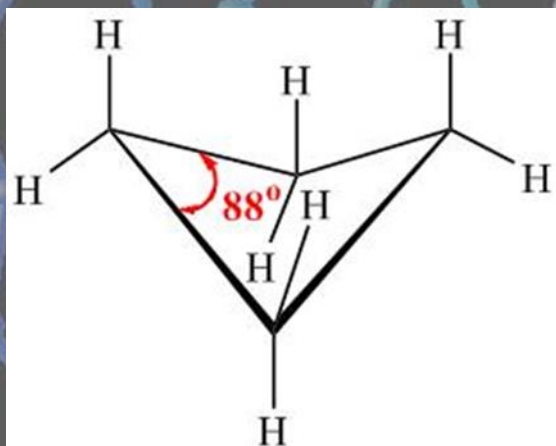


Calor de combustión

Conformación de cicloalcanos

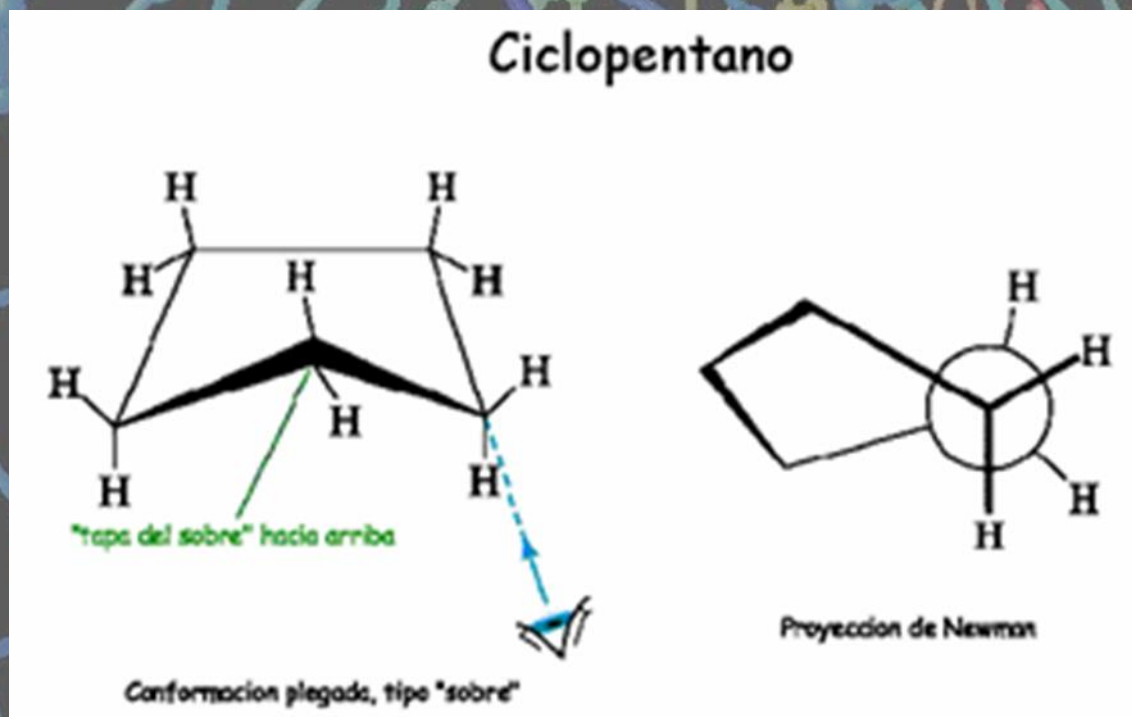
Tamaño de anillo	Cicloalcano	Calor de combustión (Kcal/mol)	Calor de combustión / CH ₂ (Kcal/mol)	Tensión de anillo por CH ₂ (Kcal/mol)	Tensión de anillo total (Kcal/mol)
3	Ciclopropano	499,8	166,6	9,2	27,6
4	Ciclobutano	655,9	164,0	6,6	26,4
5	Ciclopentano	793,5	158,7	1,3	6,5
6	Ciclohexano	944,5	157,4	0,0	0,0
7	Cicloheptano	1108,3	158,3	0,9	6,3
8	Ciclooctano	1268,9	158,6	1,2	9,6
Alcano de referencia, de cadena larga			157,4	0,0	0,0

Conformación de cicloalcanos



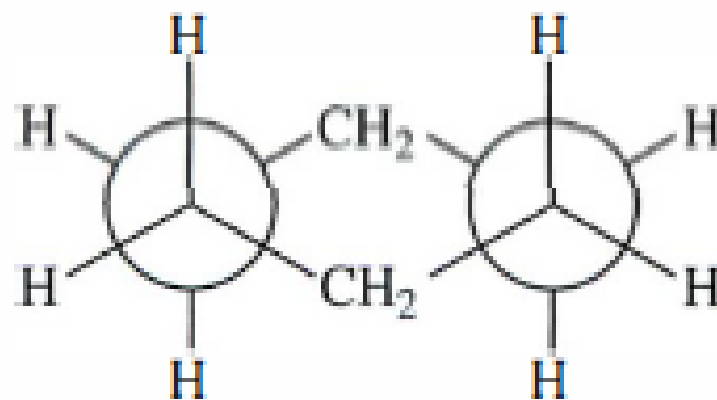
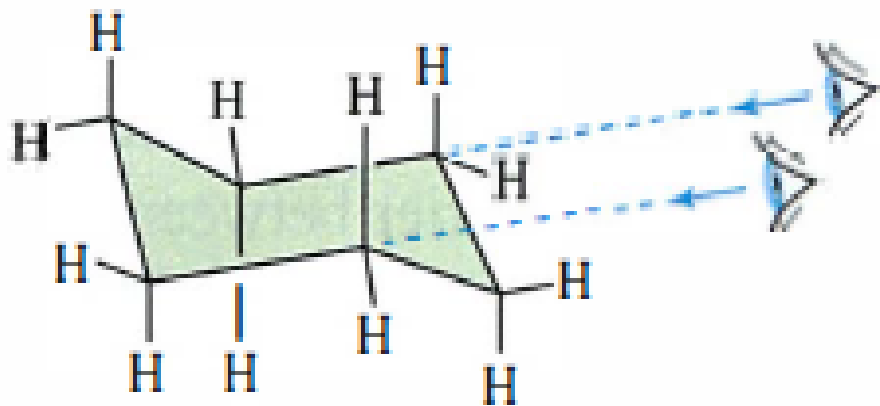
CONFORMACIÓN DEL CICLOBUTANO

Conformación de cicloalcanos

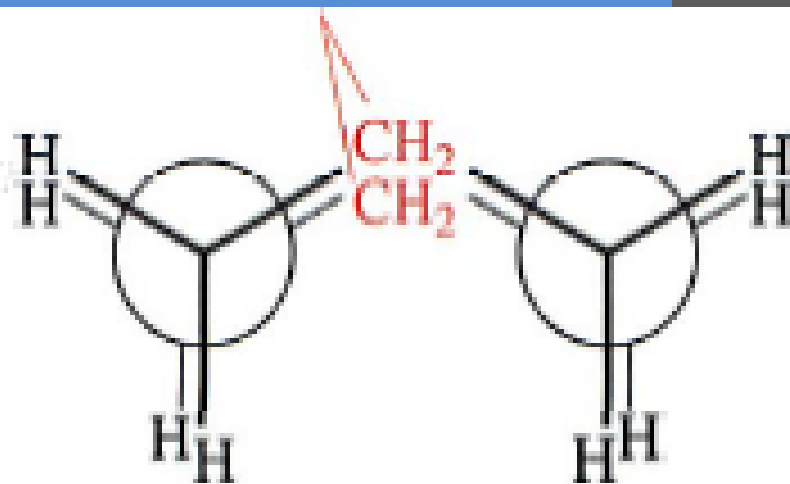
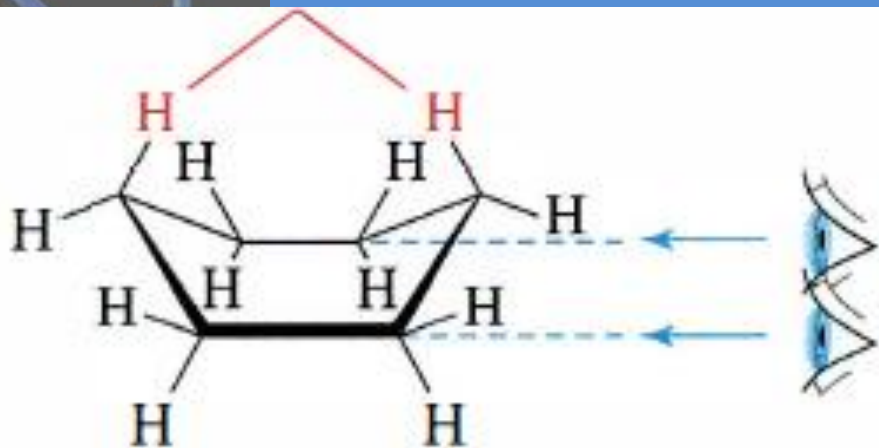


CONFORMACIÓN DEL CICLOPENTANO

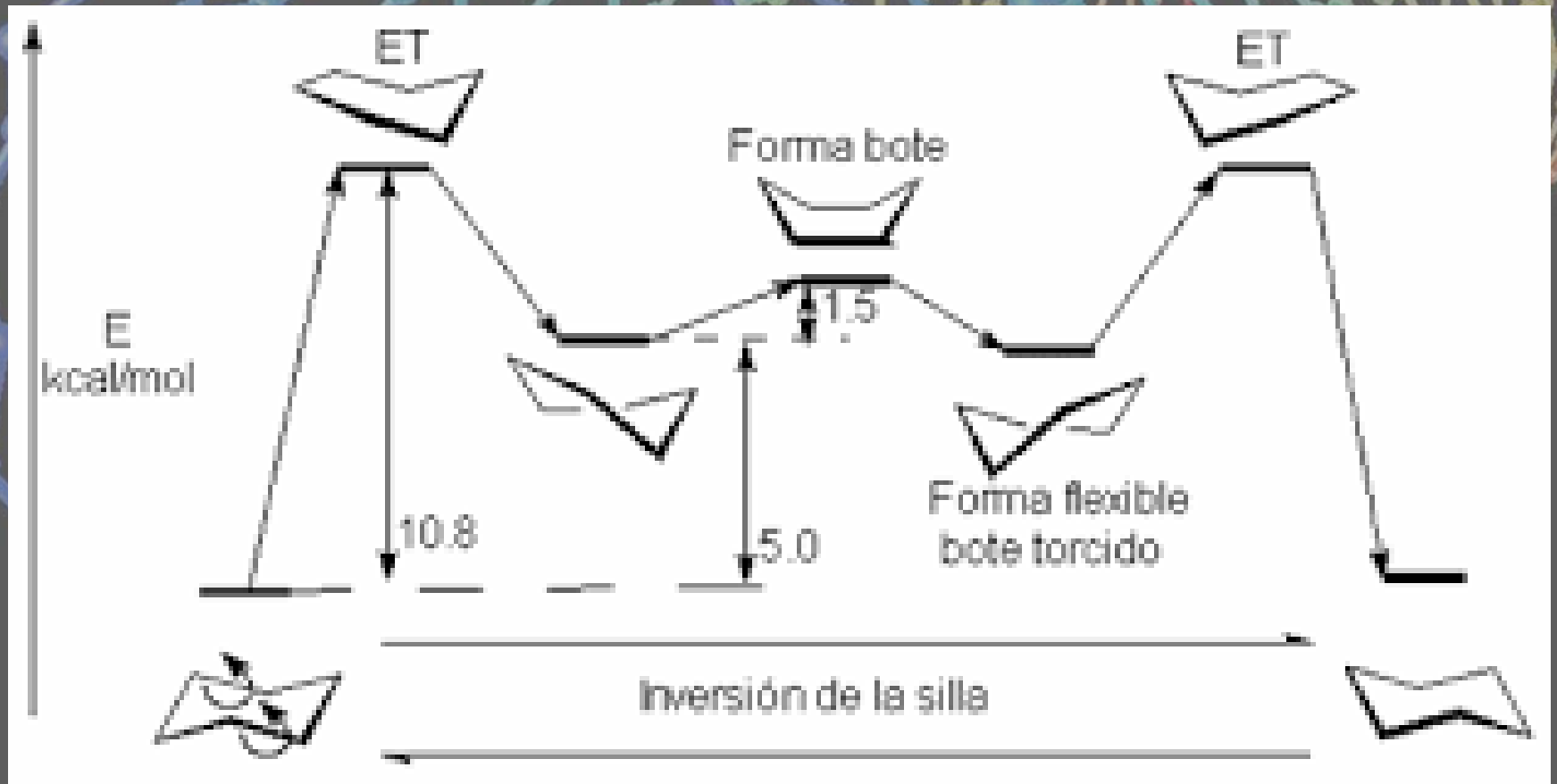
Conformación de cicloalcanos



CONFORMACIONES DEL CICLOHEXANO

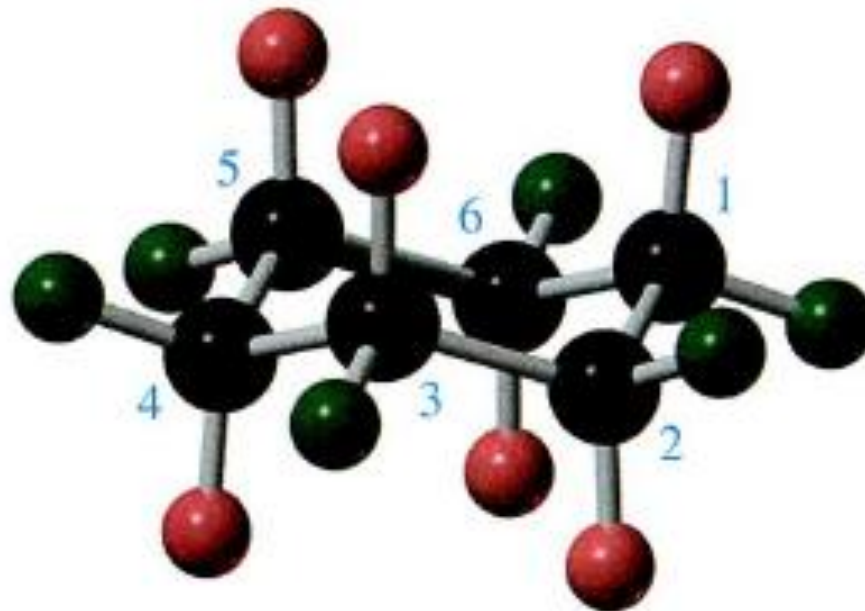
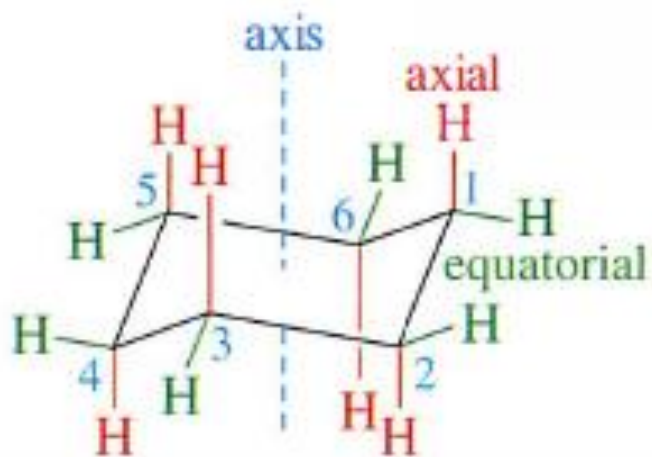


Conformación de cicloalcanos



EQUILIBRIO ENTRE CONFORMACIONES DEL CICLOHEXANO

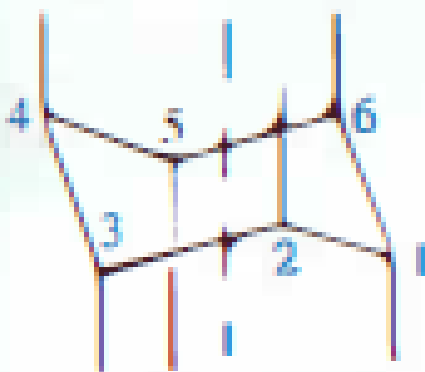
Conformación de cicloalcanos



POSICIONES AXIALES Y ECUATORIALES EN CICLOHEXANOS

Conformación de cicloalcanos

AXIAL



ECUATORIAL



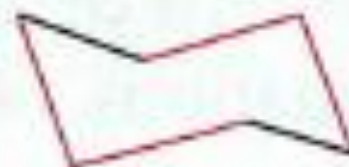
pendiente a



pendiente b



pendiente c





Muchas gracias!!