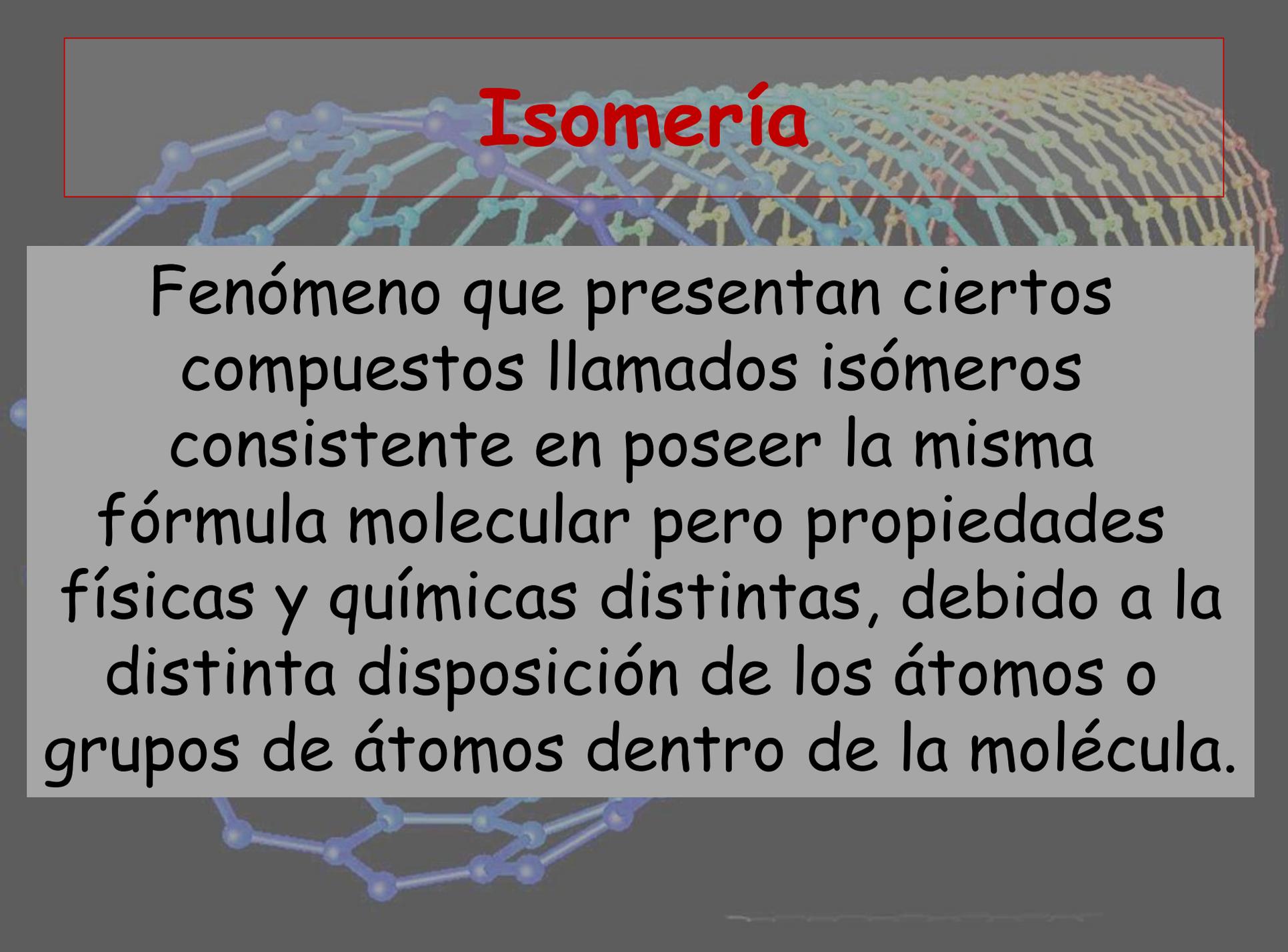




# QUÍMICA ORGÁNICA I

Florencia Grasso  
fgrasso@agro.unc.edu.ar

Isomería II



# 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 geométrica

Isomería  
conformacional

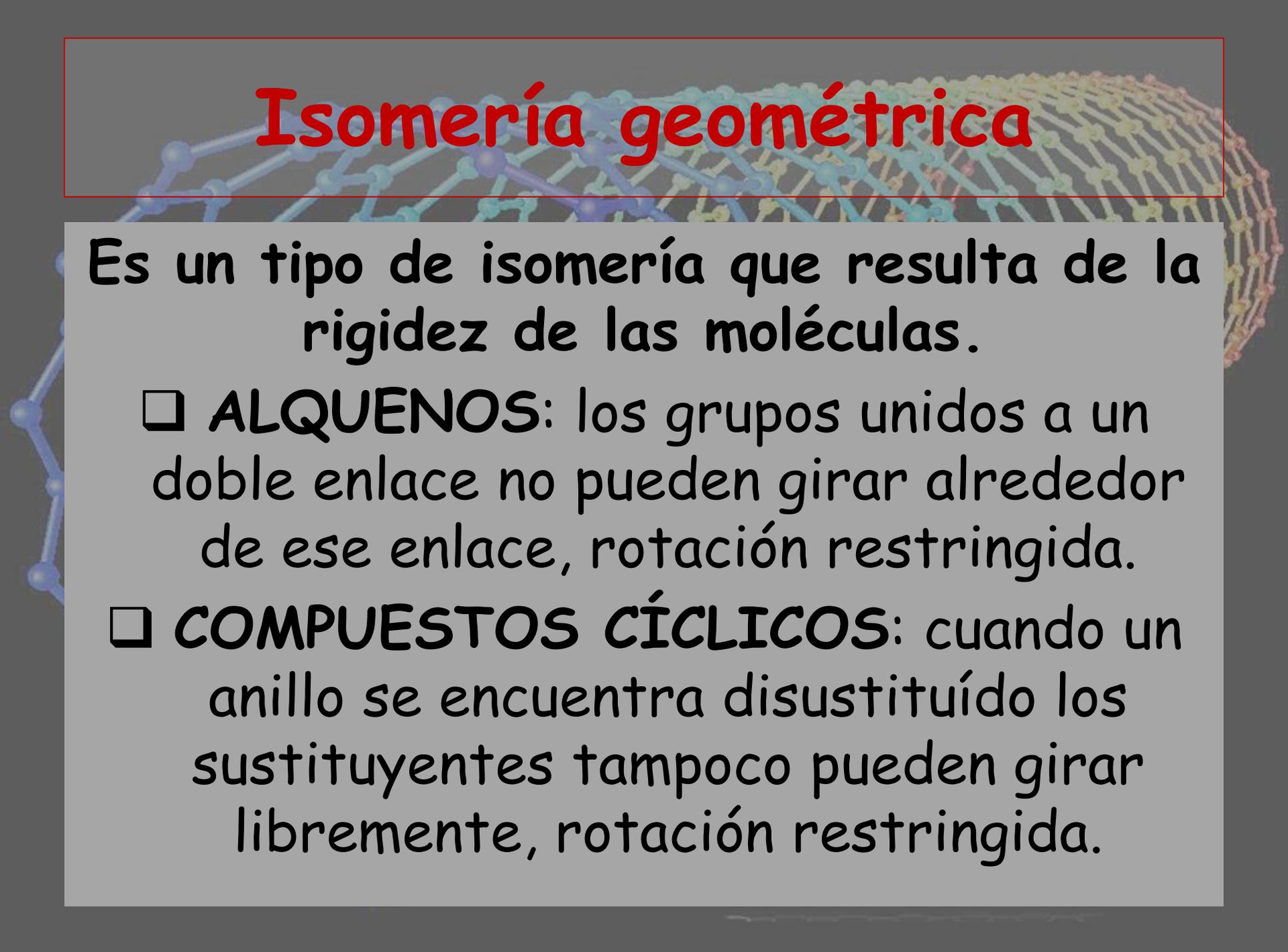
Compuestos con igual fórmula molecular, igual estructura, igual configuración, pero distinta conformación

Isomería óptica

Estereoisomería

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

# Isomería geométrica

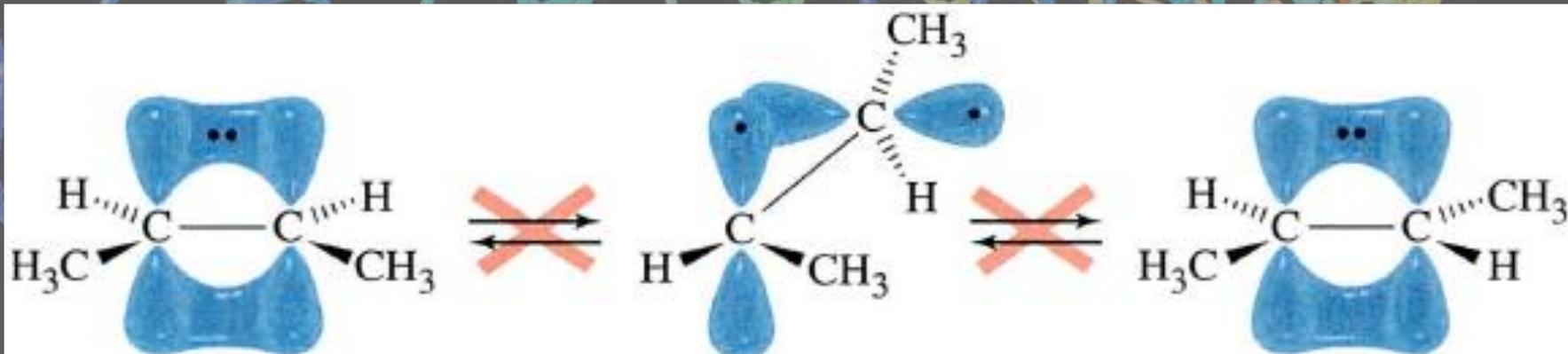


Es un tipo de isomería que resulta de la rigidez de las moléculas.

- ❑ **ALQUENOS:** los grupos unidos a un doble enlace no pueden girar alrededor de ese enlace, rotación restringida.
- ❑ **COMPUESTOS CÍCLICOS:** cuando un anillo se encuentra disustituído los sustituyentes tampoco pueden girar libremente, rotación restringida.

# Isomería geométrica

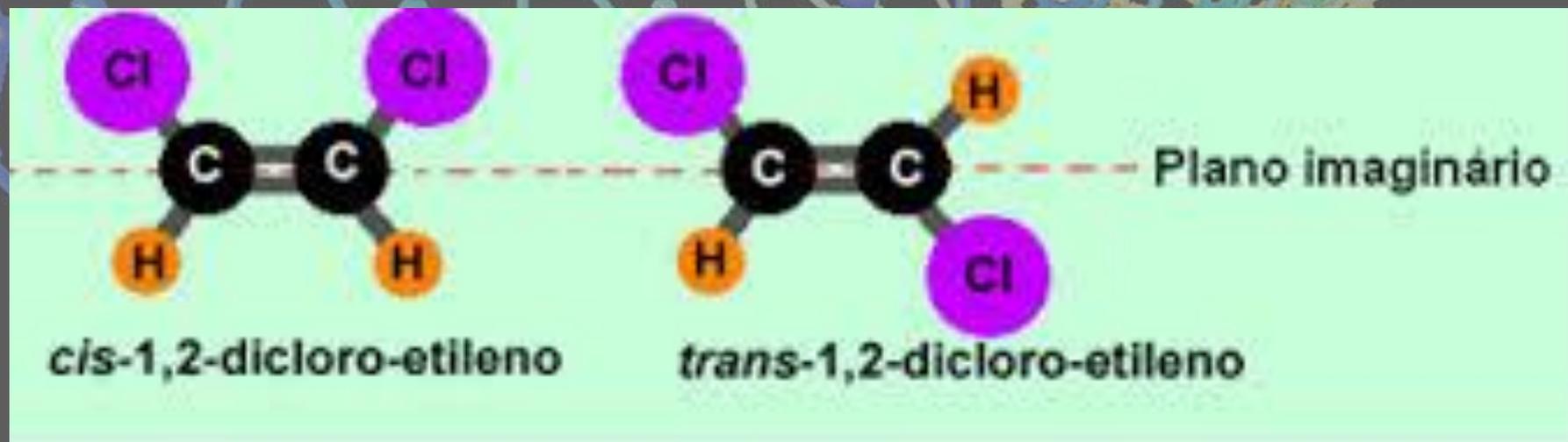
## ALQUENOS



Rotación restringida

# Isomería geométrica

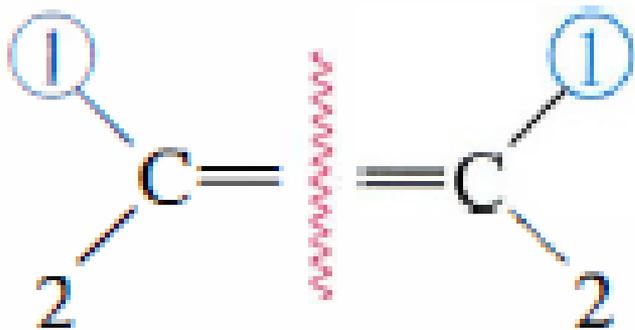
$\text{CHCl}=\text{CHCl}$  1,2-dicloroetileno



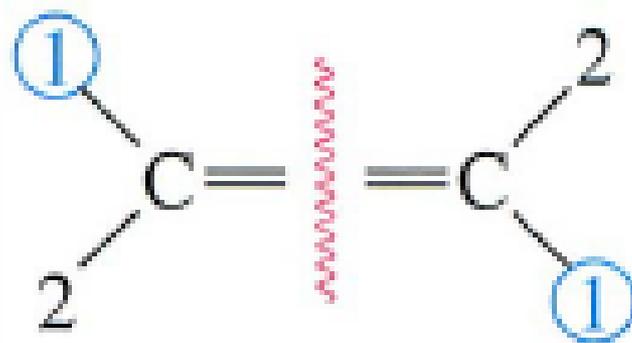
# Isomería geométrica

## Nomenclatura: reglas de Cahn-Ingold-Prelog

establecer prioridades

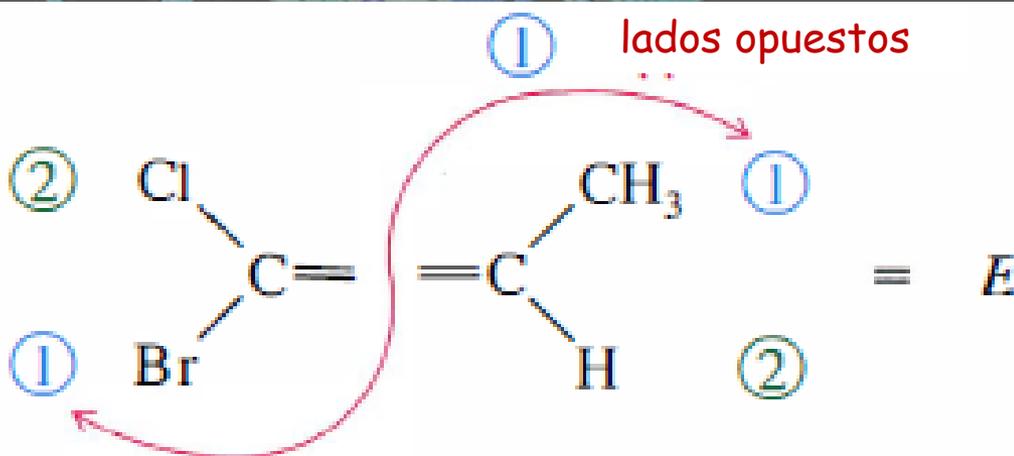
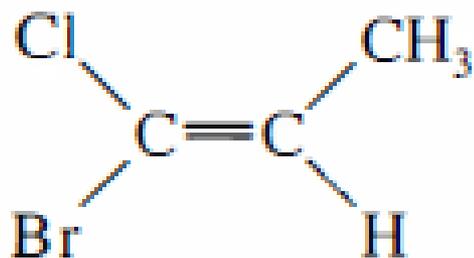
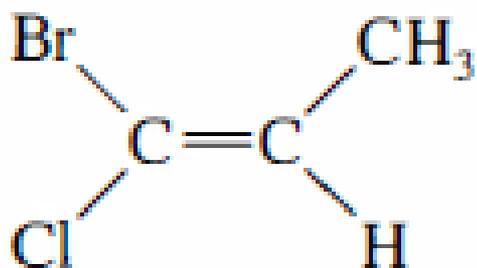


Zusammen



Entgegen

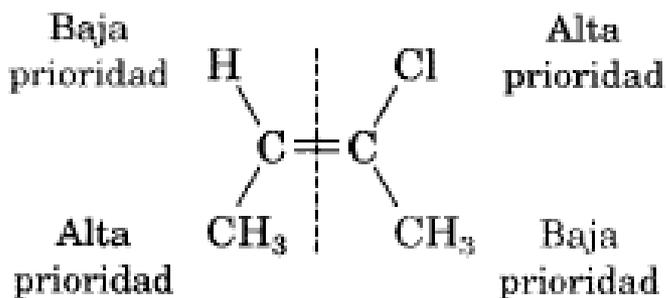
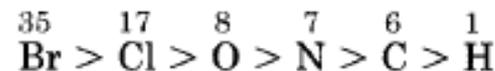
# Isomería geométrica



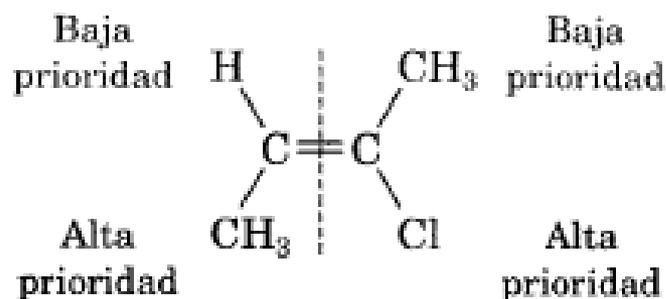
# Isomería geométrica

## Reglas para asignar prioridades

- Considerar por separado cada uno de los átomos de carbono, identificar los dos átomos directamente unidos y clasificar por número atómico. La mayor prioridad es para el mayor número atómico.



(a) (*E*)-2-Cloro-2-buteno

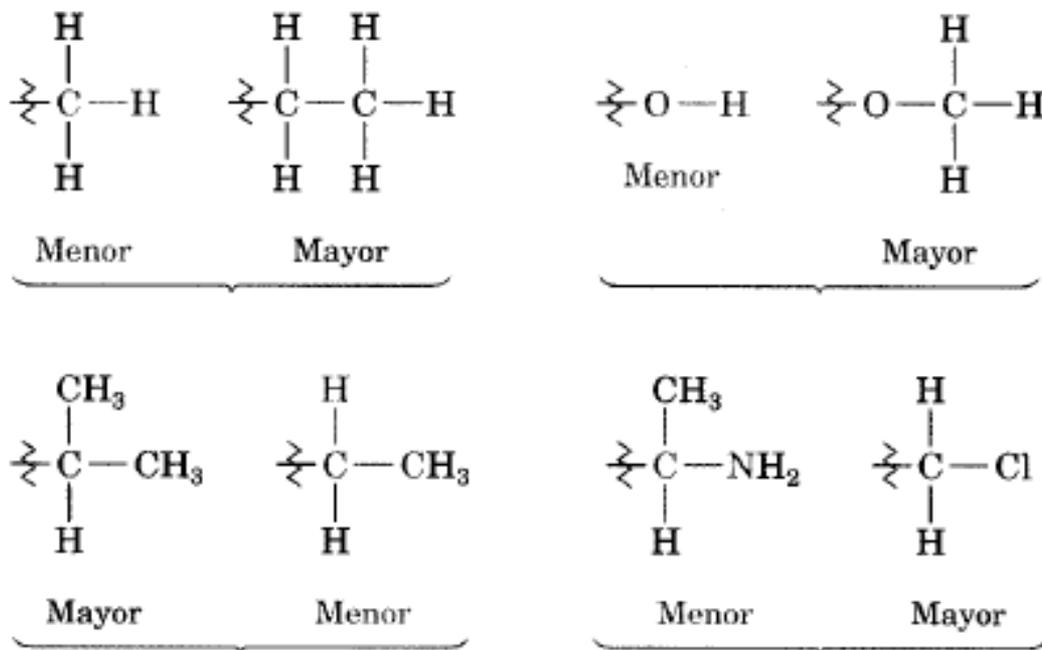


(b) (*Z*)-2-Cloro-2-buteno

# Isomería geométrica

## Reglas para asignar prioridades

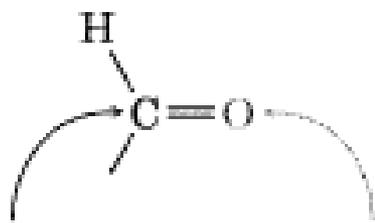
- Si los primeros átomos son iguales en el sustituyente, considerar los segundos, terceros o cuartos alejándose de los carbonos hasta encontrar la primera diferencia.



# Isomería geométrica

## Reglas para asignar prioridades

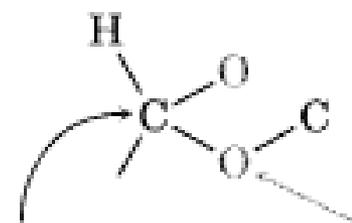
- Los átomos con enlace múltiple equivalen a la misma cantidad de átomos con enlace sencillo.



Este carbono está enlazado a H, O, O

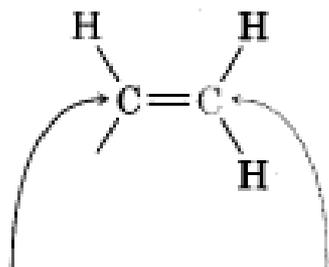
Este oxígeno está enlazado a C, C

equivale a



Este carbono está enlazado a H, O, O

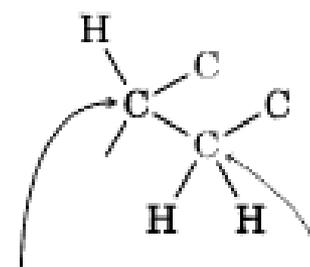
Este oxígeno está enlazado a C, C



Este carbono está enlazado a H, C, C

Este carbono está enlazado a H, H, C, C

equivale a

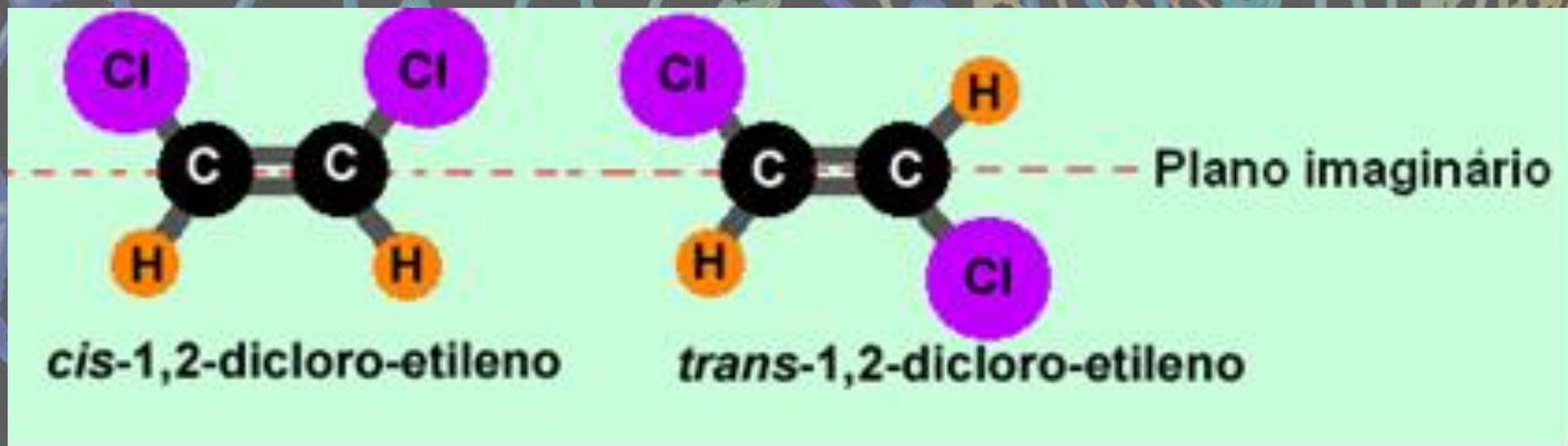


Este carbono está enlazado a H, C, C

Este carbono está enlazado a H, H, C, C

# Isomería geométrica

## Nomenclatura *CIS* - *TRANS*



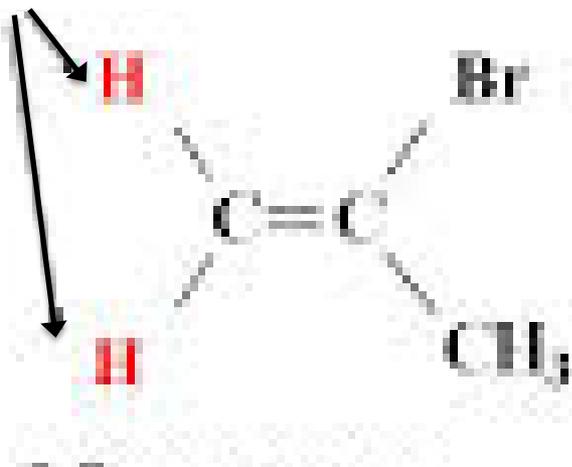
del mismo lado del plano      de lados opuestos al plano

La nomenclatura *cis-trans* es un caso particular de la nomenclatura *E-Z* en moléculas sencillas (existen 2 sustituyentes iguales que se pueden tomar como referencia)

# Isomería geométrica

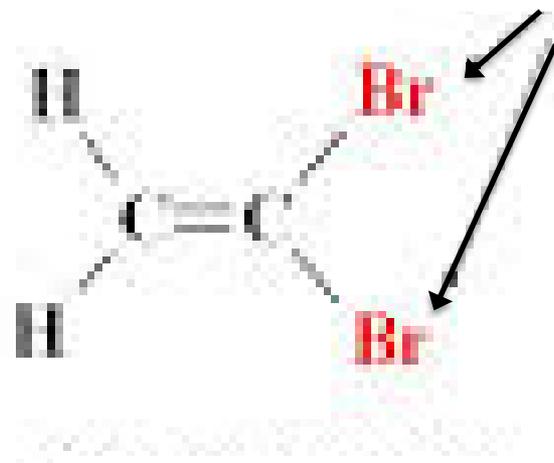
LOS ALQUENOS NO PUEDEN TENER ISÓMEROS GEOMÉTRICOS SI UN ÁTOMO DE CARBONO DEL DOBLE ENLACE ESTÁ UNIDO A GRUPOS IDÉNTICOS

idénticos



2-Bromopropeno

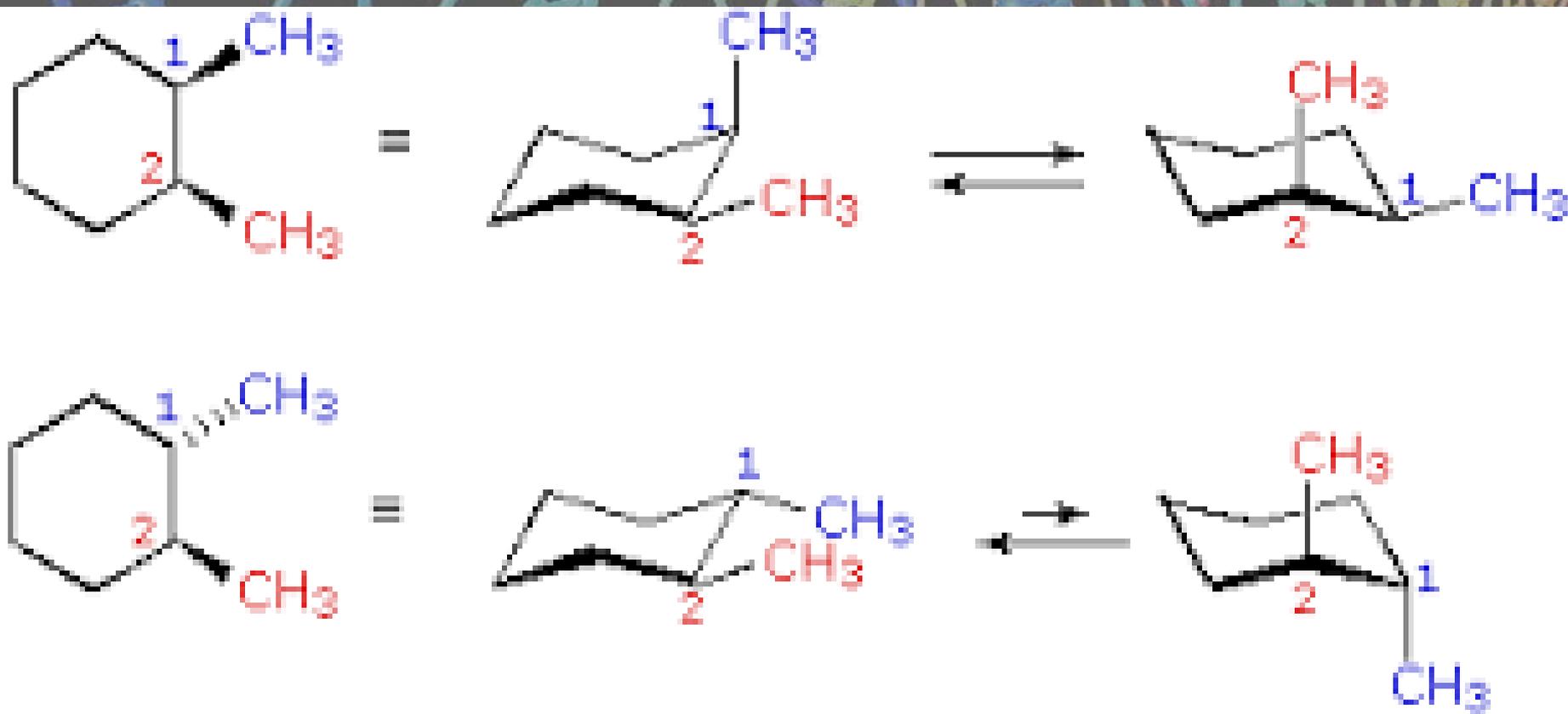
idénticos



1,1-Dibromoeteno

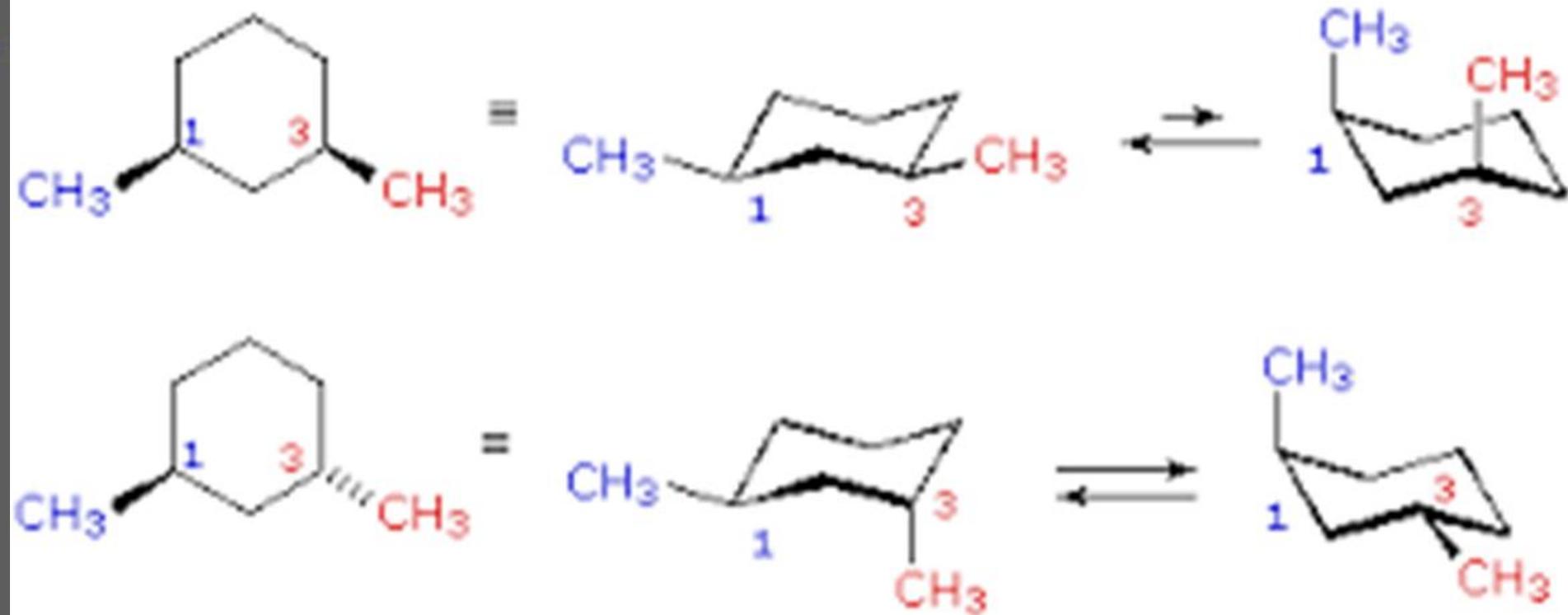
# Isomería geométrica

## Ciclohexanos disustituidos 1,2



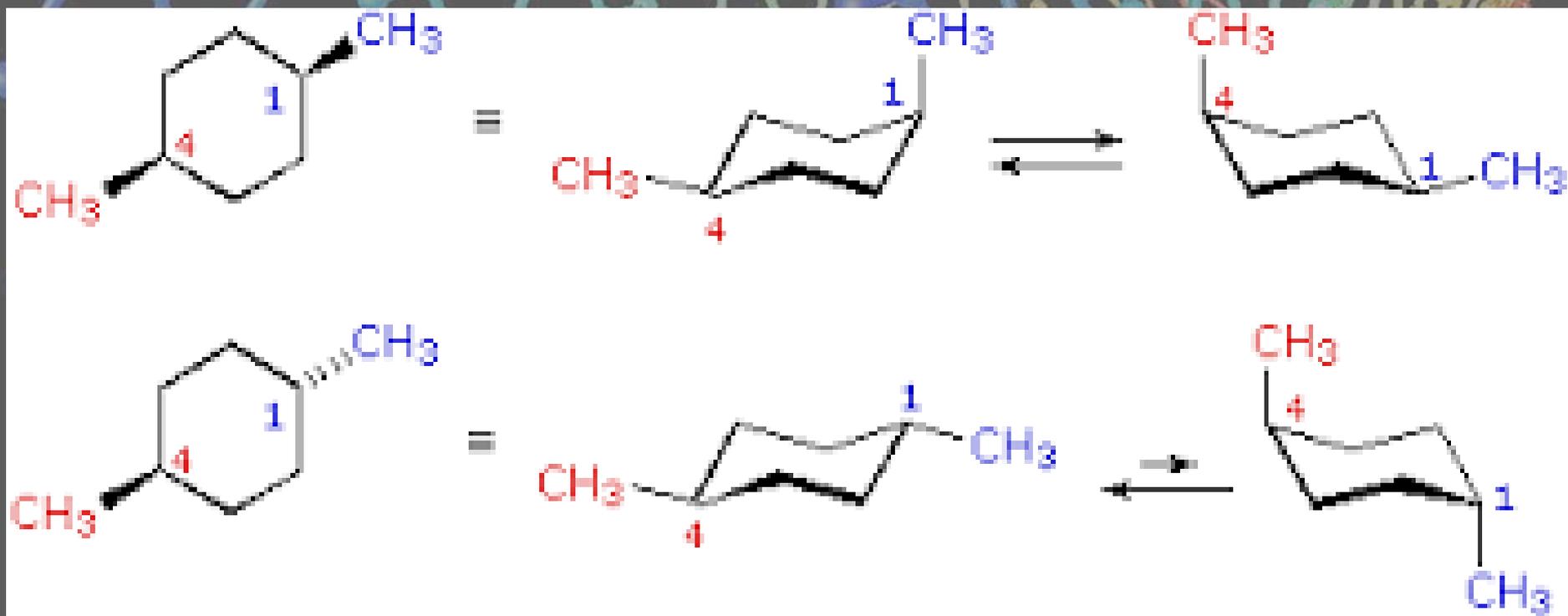
# Isomería geométrica

## Ciclohexanos disustituidos 1,3

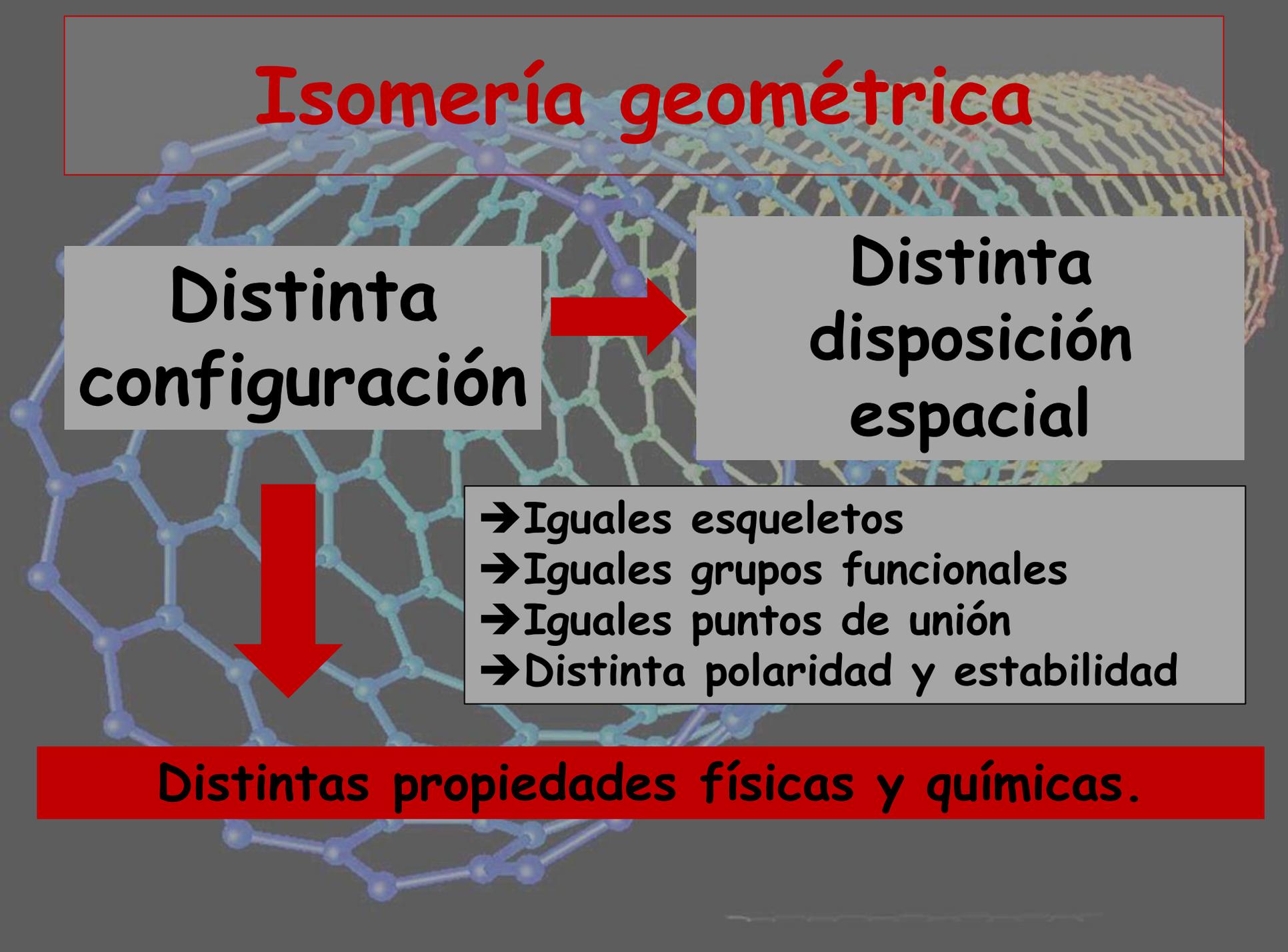


# Isomería geométrica

## Ciclohexanos disustituidos 1,4



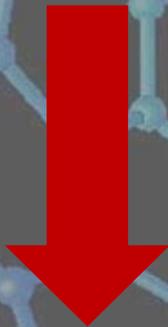
# Isomería geométrica



Distinta  
configuración



Distinta  
disposición  
espacial

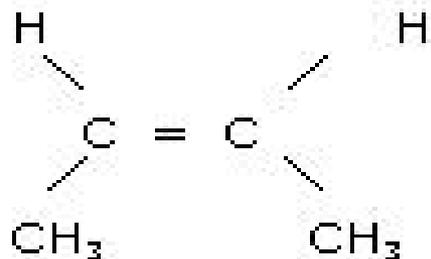


- Iguales esqueletos
- Iguales grupos funcionales
- Iguales puntos de unión
- Distinta polaridad y estabilidad

Distintas propiedades físicas y químicas.

# Isomería geométrica

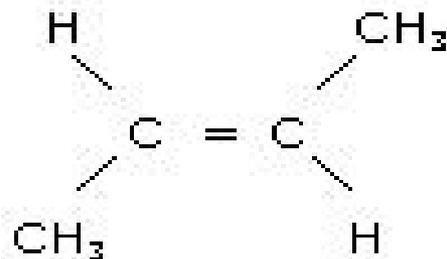
## PROPIEDADES FISICAS DIFERENTES



Cis-2-buteno

Punto de ebullición: 3,7°C

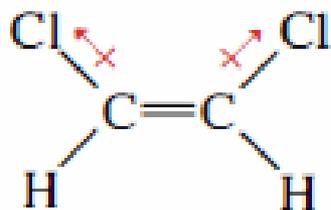
Punto de fusión: -139°C



Trans-2-buteno

Punto de ebullición: 0,3°C

Punto de fusión: -106°C

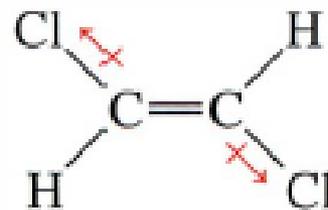


cis

vector sum =  $\uparrow$

$\mu = 24 \text{ D}$

bp = 60°C



trans

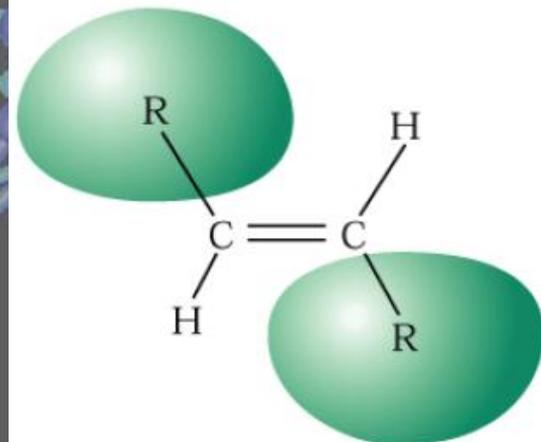
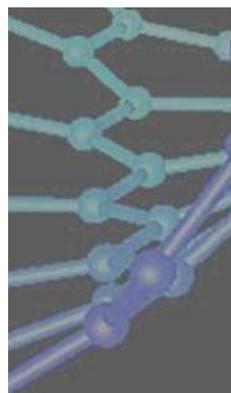
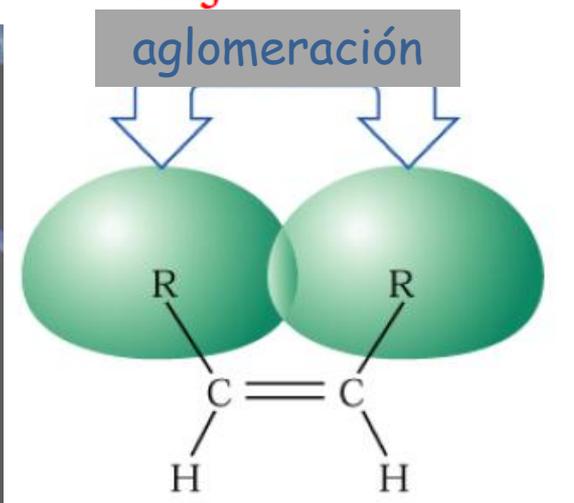
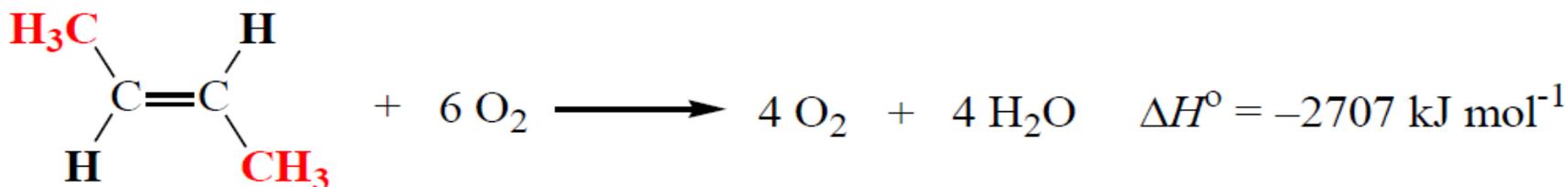
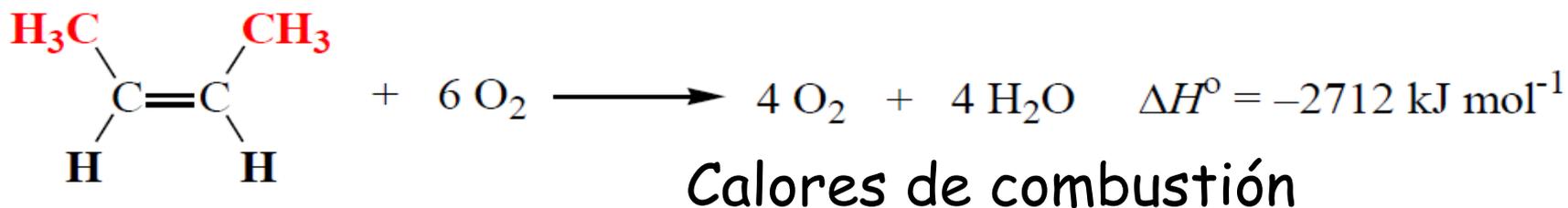
vector sum = 0

$\mu = 0$

bp = 48°C

# Isomería geométrica

## PROPIEDADES QUÍMICAS DIFERENTES



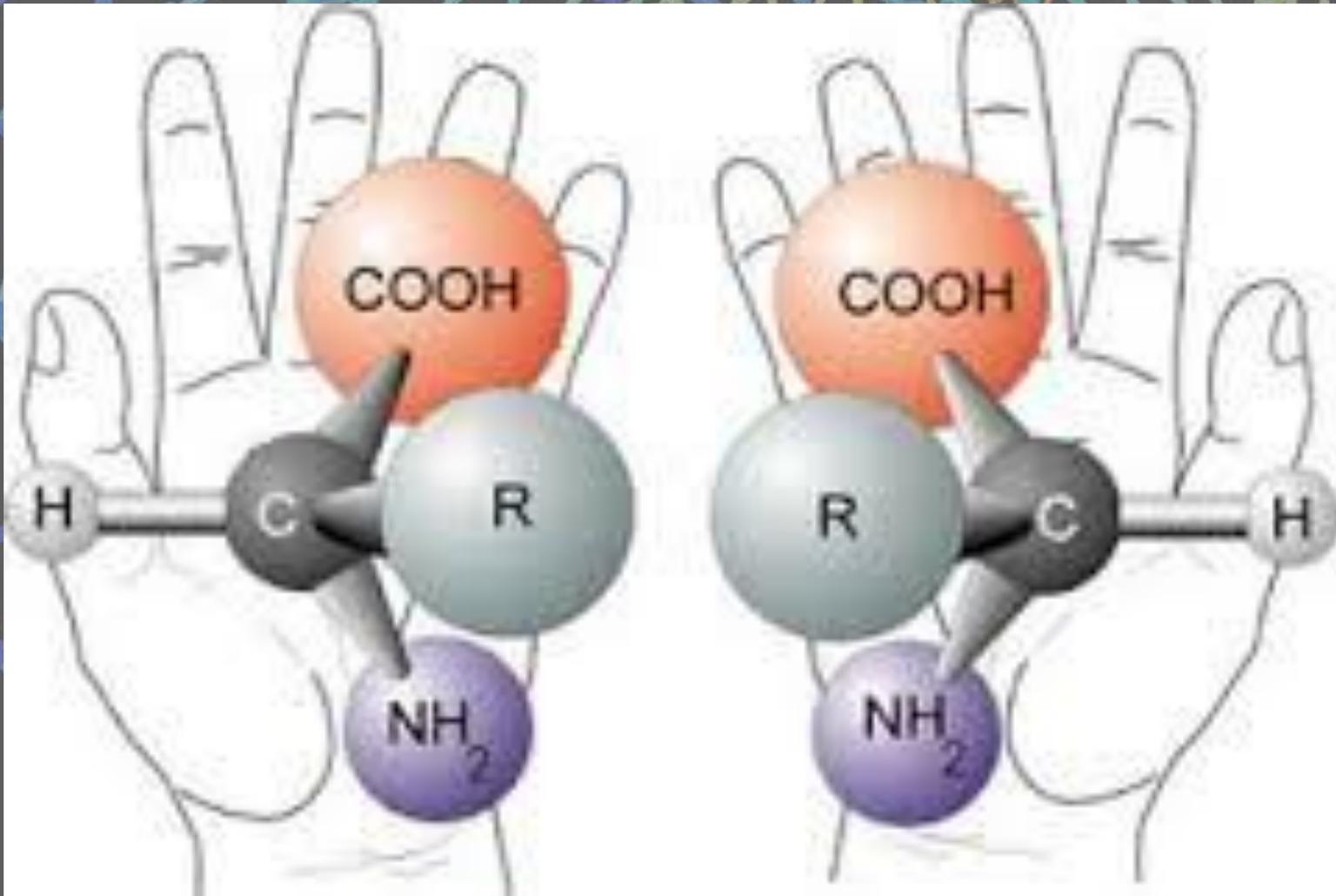
# Isomería óptica



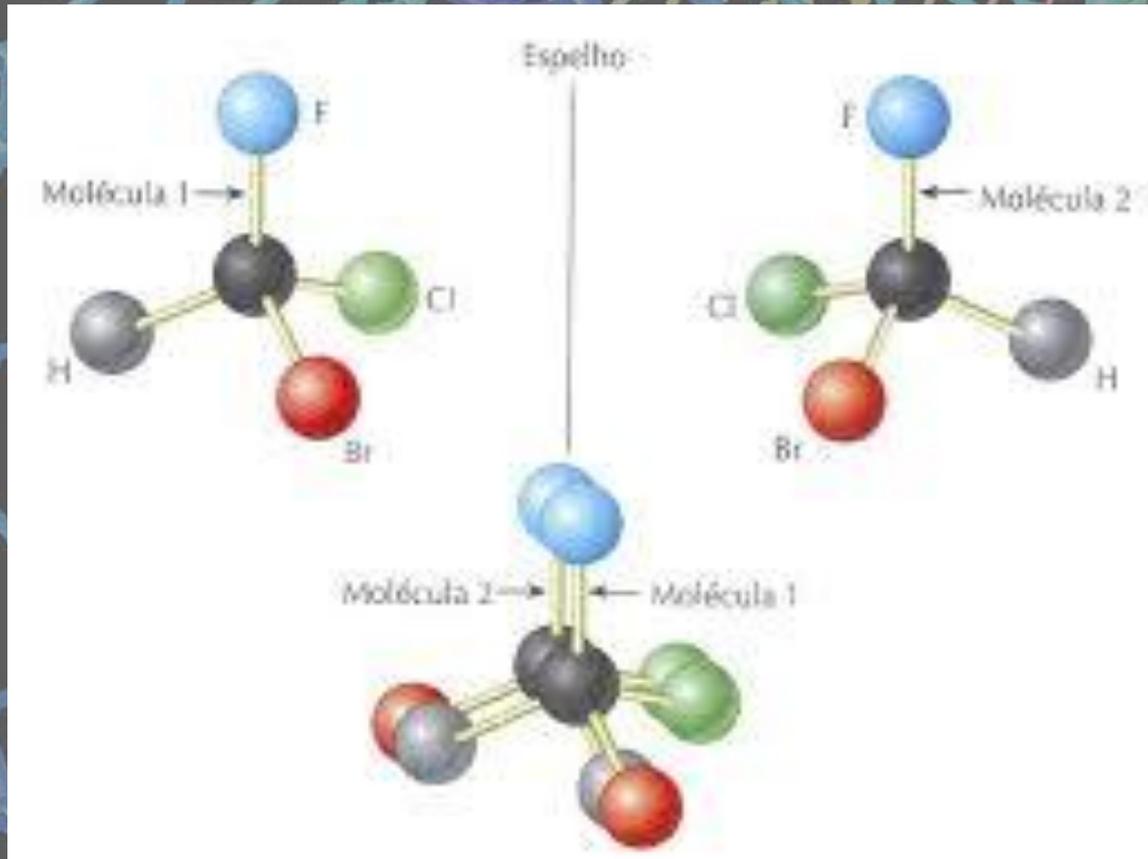
La isomería óptica se presenta en moléculas que son asimétricas como consecuencia directa de la disposición espacial de sus átomos.

- Moléculas con centro quirales: átomos de carbono con hibridación  $sp^3$  con 4 sustituyentes diferentes.
  - Moléculas con un plano quiral: se identifica un plano interno de asimetría.

# Isomería óptica

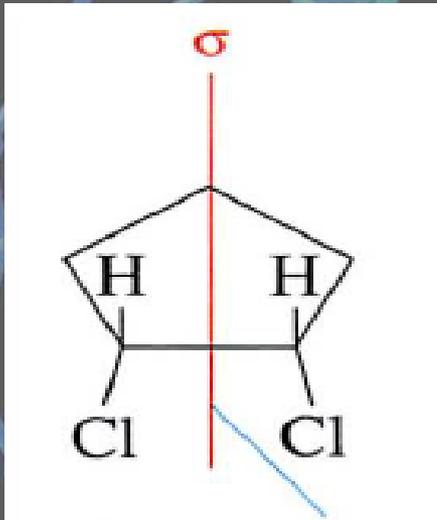


# Isomería óptica

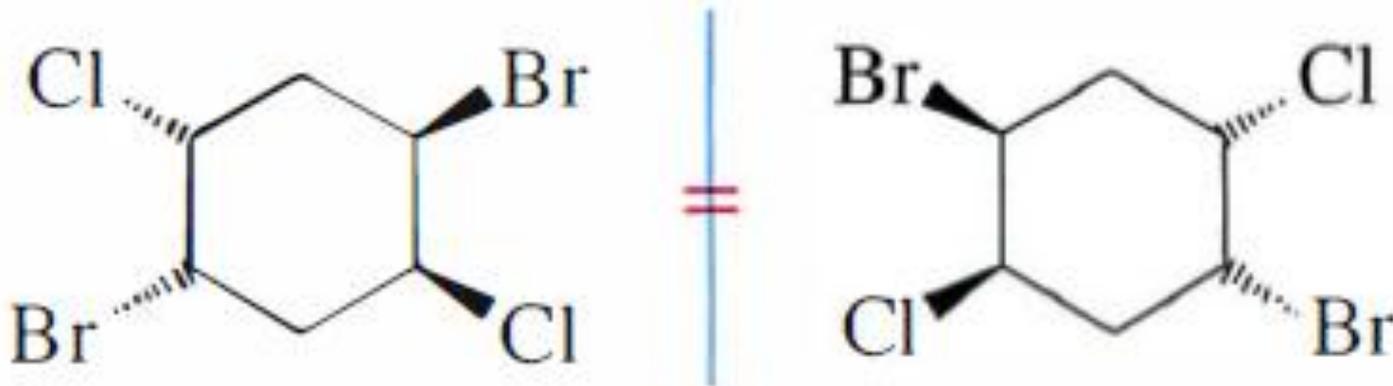


Las imágenes especulares no se superponen =  
**ENANTIÓMEROS**

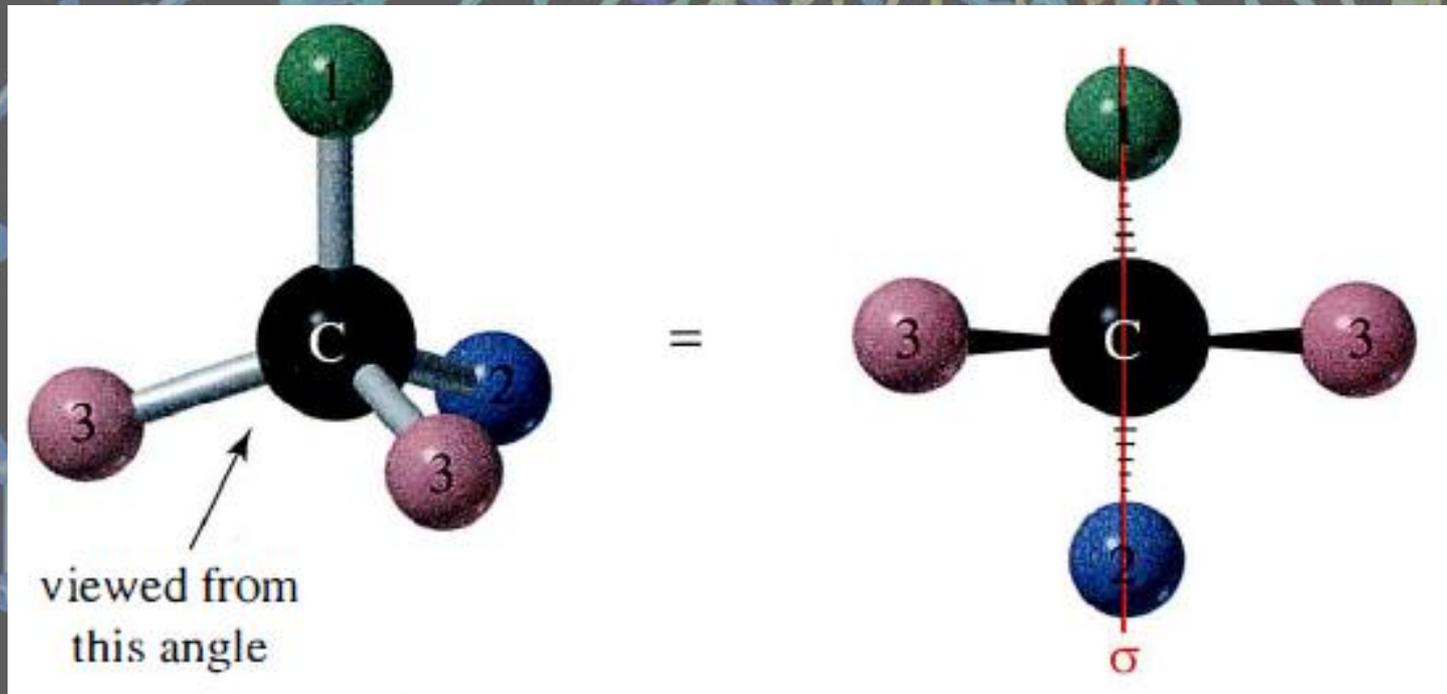
# Isomería óptica



Plano interno de simetría  
Molécula aquiral  
No presenta isomería óptica



# Isomería óptica



Plano interno de simetría, molécula aquiral  
No presenta isomería óptica

# Isomería óptica

Distinta  
configuración



Distinta  
disposición  
espacial

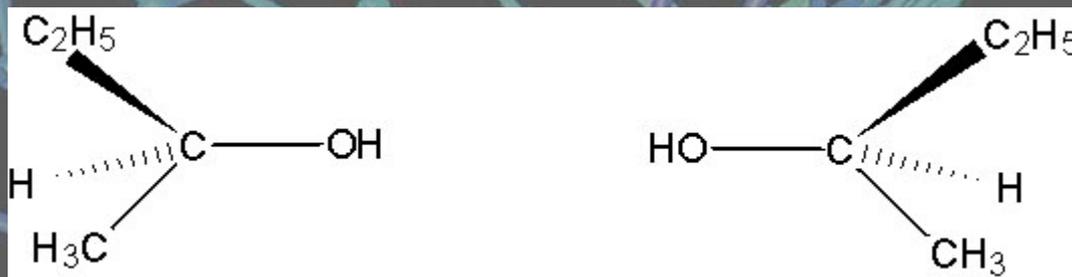


- Iguales esqueletos
- Iguales grupos funcionales
- Iguales puntos de unión

Iguales propiedades físicas y químicas, excepto la reactividad estereoespecífica (reacciones químicas, procesos enzimáticos y biológicos) y la rotación específica.

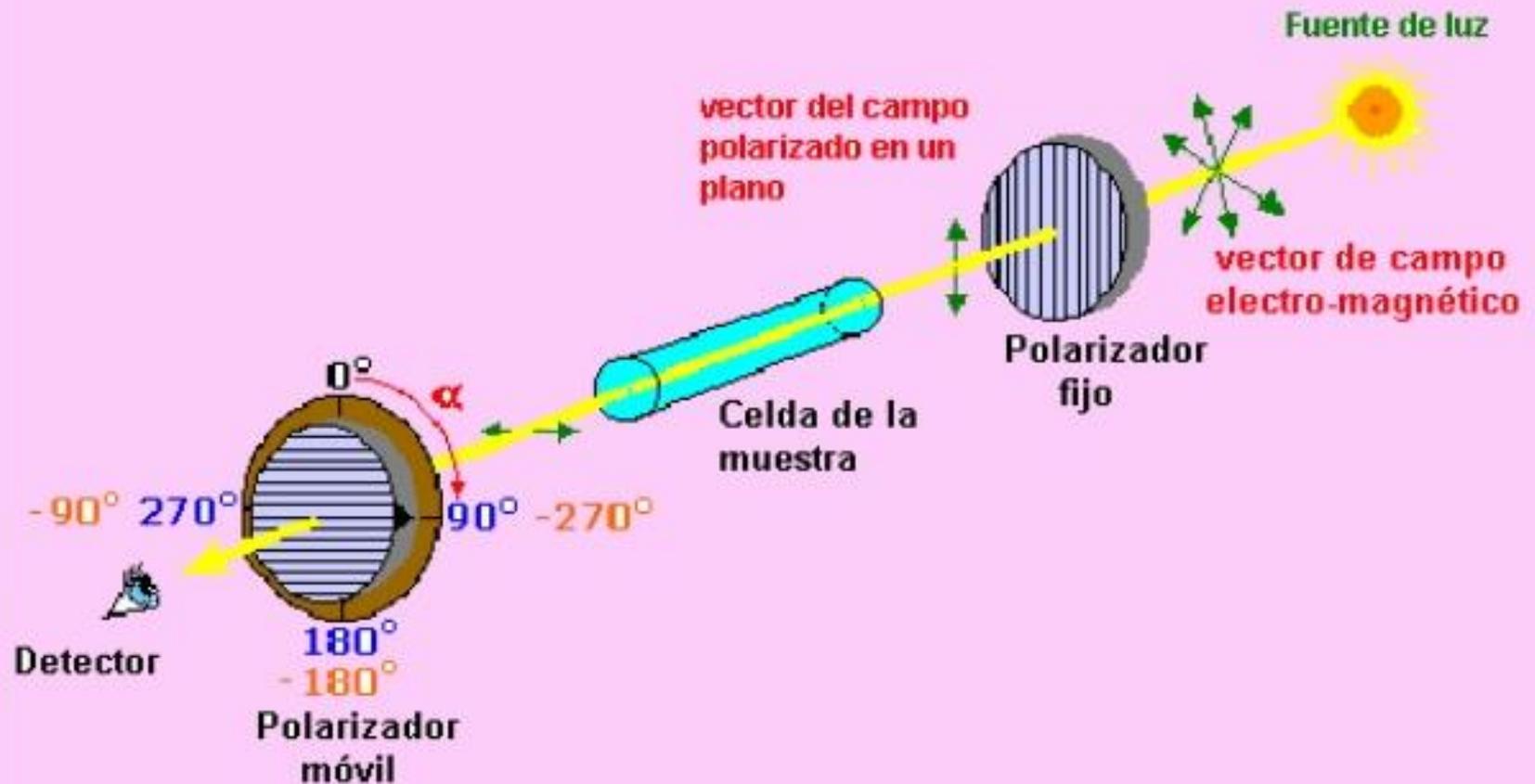
# Isomería óptica

Propiedad física	(+)-2-Butanol	(-)-2-Butanol
Punto de ebullición	99,5 °C	99,5 °C
Densidad (g/mL)	0,808	0,808
Índice de refracción	1,397	1,397
Ángulo de rotación específica, $[\alpha]_D$	+ 13,5 °	- 13,5 °



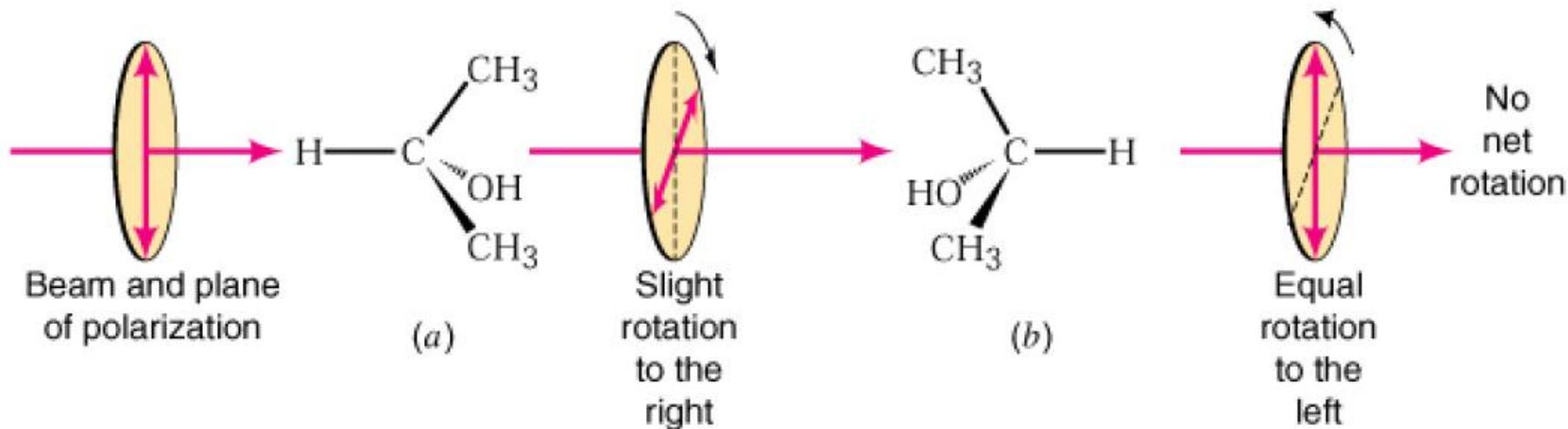
$$[\alpha]_D = \frac{\text{Rotación observada (grados)}}{\text{Longitud de trayectoria, } l \text{ (dm)} \times \text{Concentración, } C \text{ (g/ml)}} = \frac{\alpha}{l \times C}$$

# Isomería óptica



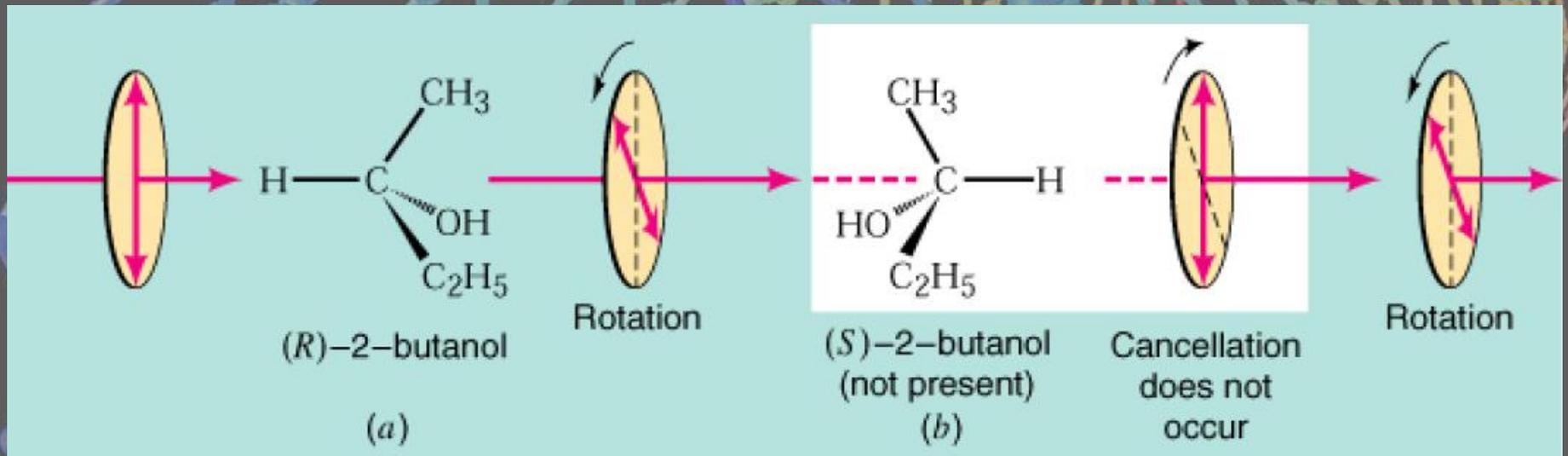
Esquema de un polarímetro

# Isomería óptica

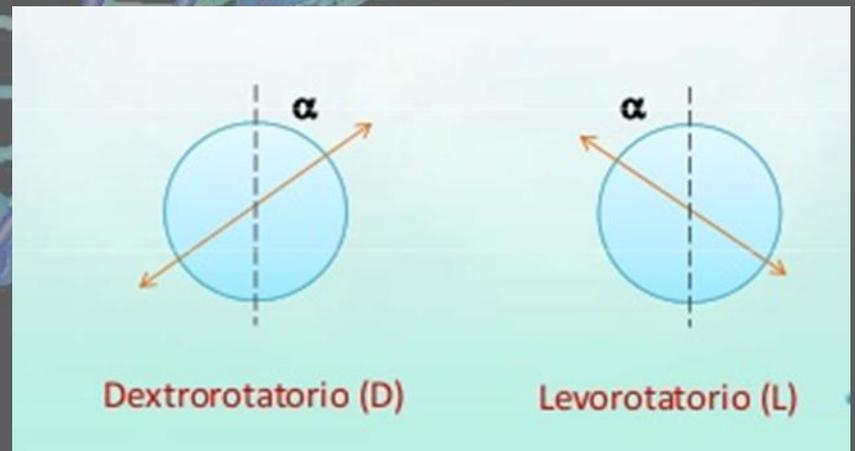


Las moléculas  
aquirales no  
presentan actividad  
óptica

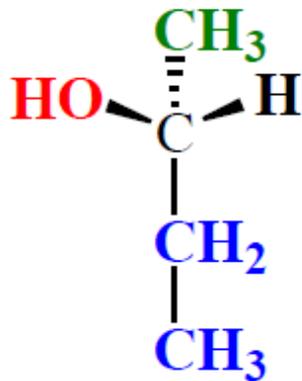
# Isomería óptica



Las moléculas  
quirales presentan  
actividad óptica

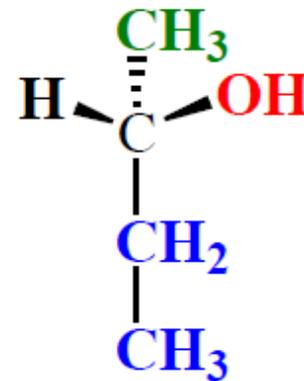


# Isomería óptica



*(R)*-(-)-2-Butanol

$$[\alpha]_D^{25} = -13.52^\circ$$



*(S)*-(+)-2-Butanol

$$[\alpha]_D^{25} = +13.52^\circ$$

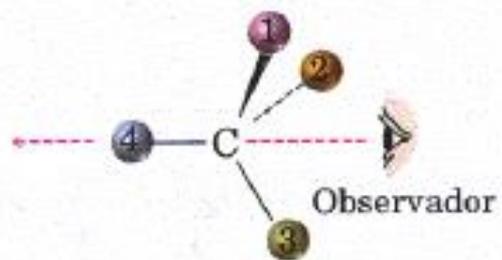
La nomenclatura R-S determina la configuración absoluta pero no tiene relación con la dirección del desvío del plano de la luz polarizada. **Este dato es experimental.**

# Isomería óptica

## Reglas para asignar prioridades

- ❑ Considerar por separado cada uno de los átomos de carbono, identificar los dos átomos directamente unidos y clasificar por número atómico. La mayor prioridad es para el mayor número atómico.
- ❑ Si los primeros átomos son iguales en el sustituyente, considerar los segundos, terceros o cuartos alejándose de los carbonos hasta encontrar la primera diferencia.
- ❑ Los átomos con enlace múltiple equivalen a la misma cantidad de átomos con enlace sencillo.

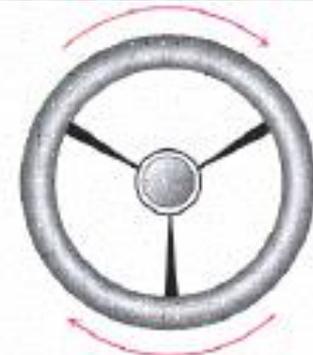
# Isomería óptica



igual que



**Configuración R**



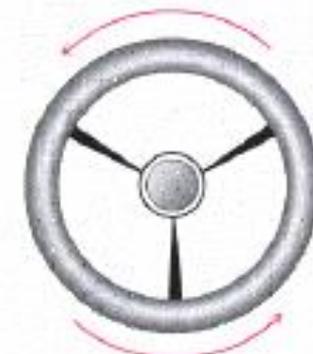
(El volante gira a la derecha)



igual que



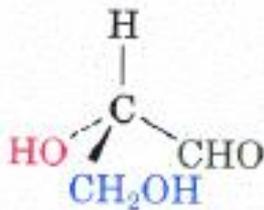
**Configuración S**



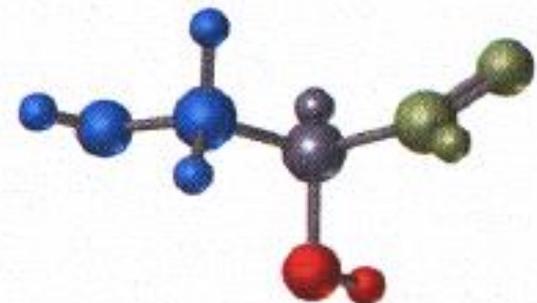
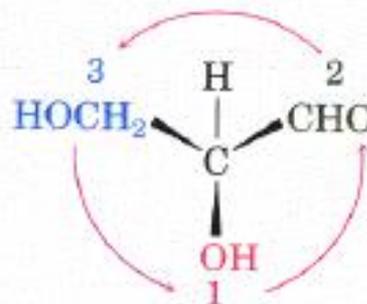
(El volante da vuelta a la izquierda)

# Isomería óptica

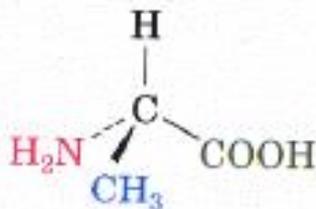
(a)



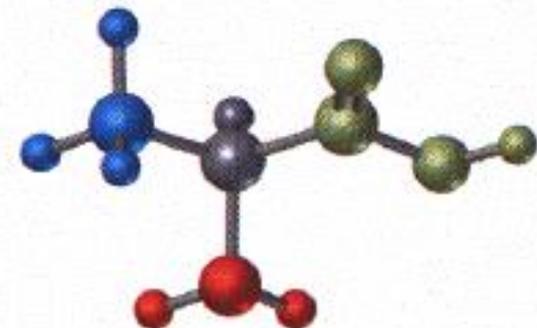
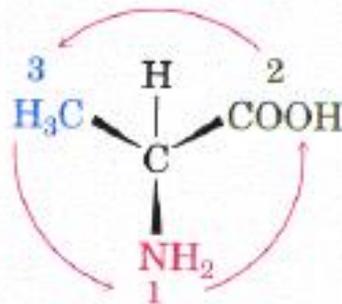
**(S)-Gliceraldehído**  
[(S)-(-)-2,3-Dihidroxiopropanal]  
 $[\alpha]_D = -8.7^\circ$



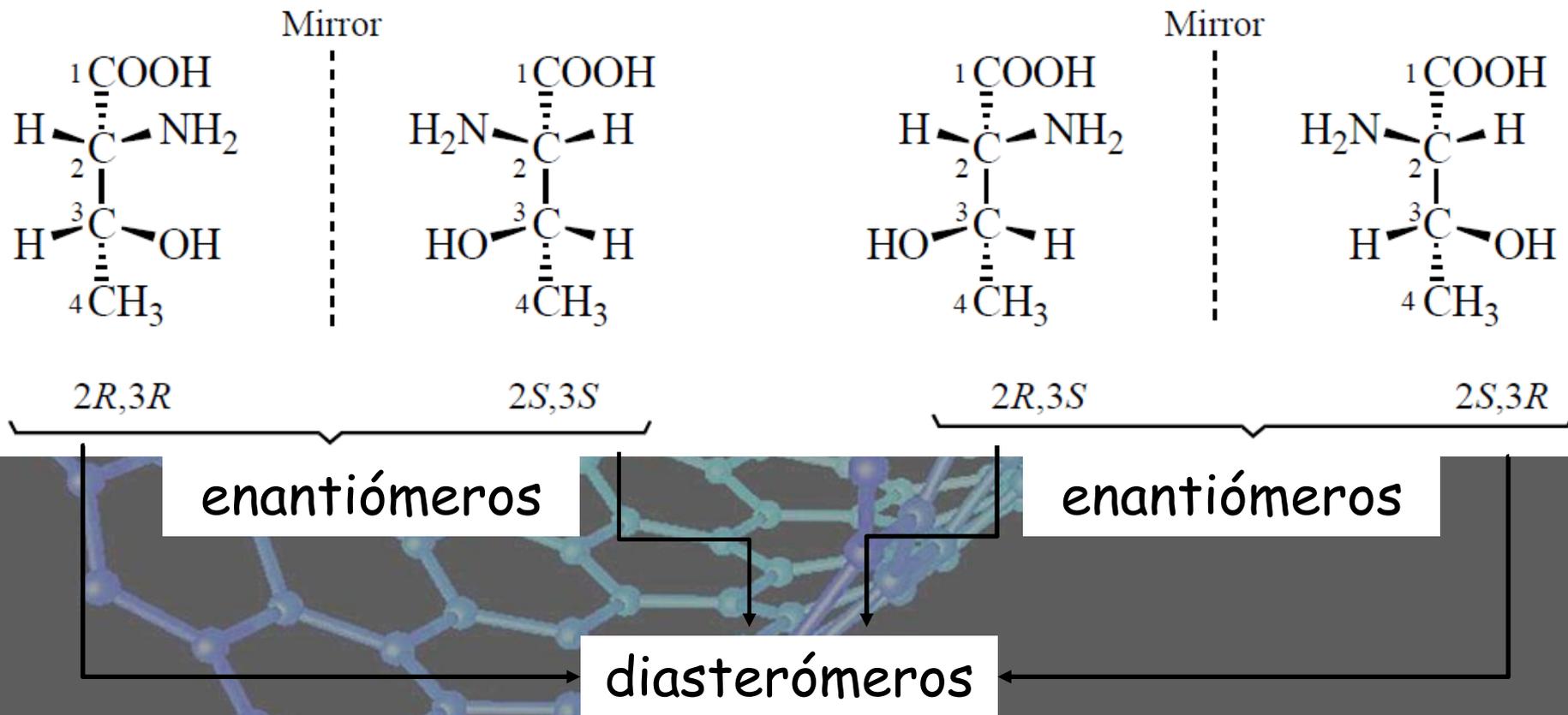
(b)



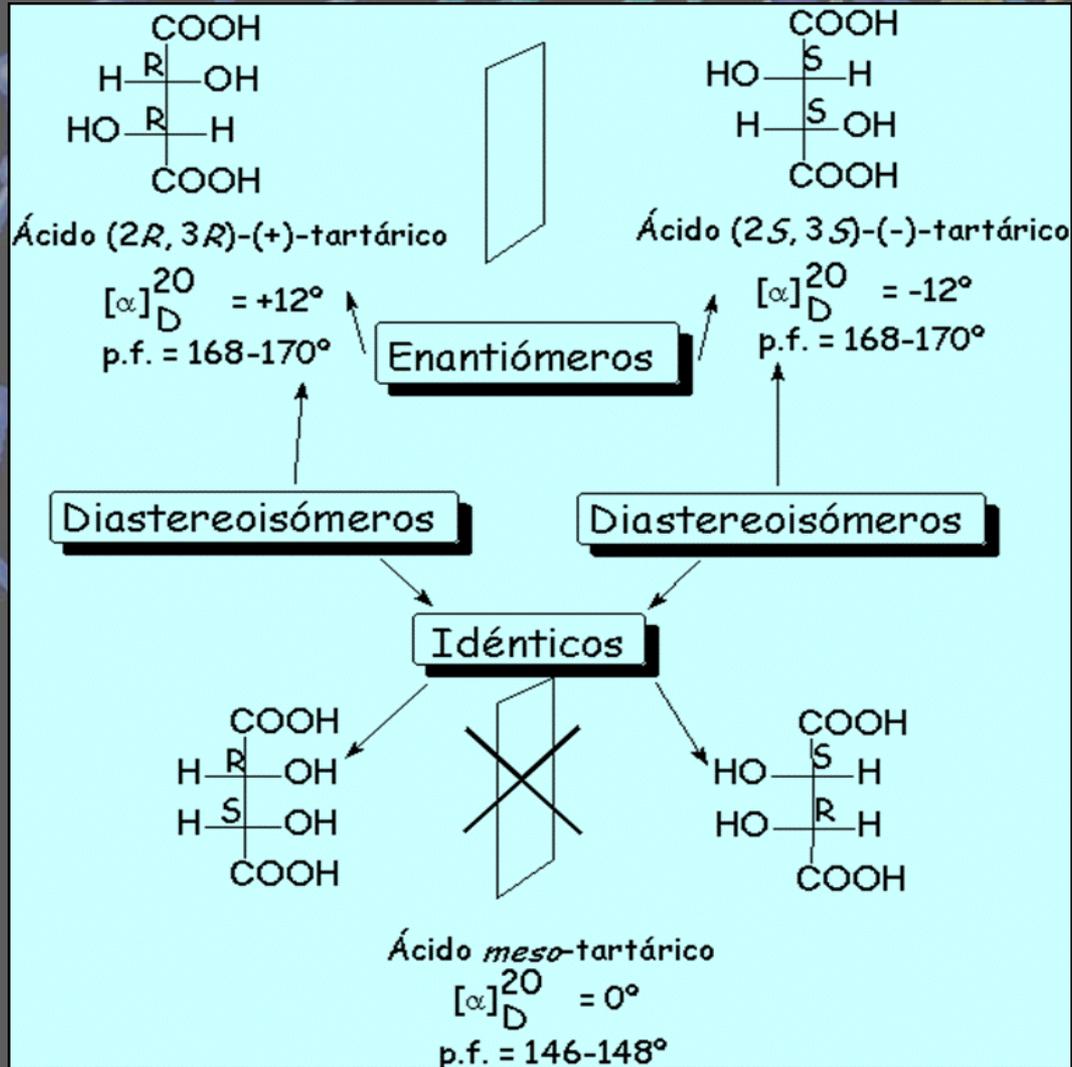
**(S)-Alanina**  
[Ácido (S)-(+)-2-aminopropanoico]  
 $[\alpha]_D = +8.5^\circ$



# Isomería óptica



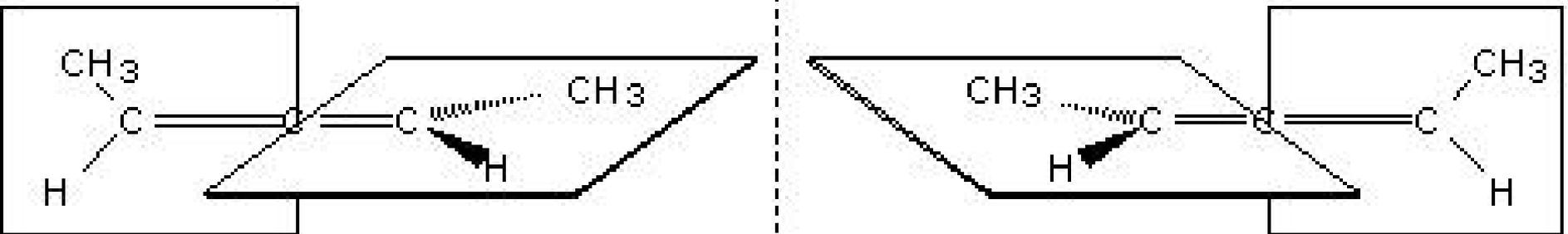
# Isomería óptica



Número de isómeros ópticos:  
 $2^n$   
Donde n es el número de carbonos quirales.

# Isomería óptica

Existen moléculas que no poseen centros quirales pero presentan actividad debido a que poseen un plano de asimetría. **Son quirales por ser asimétricas.**



**ALENOS**



**Muchas gracias!!**