



ISOMERÍA

Química II

BIO - 2015



DEFINICIÓN

- El término **isomería** procede del griego (**isos** = igual; **meros** = parte).
- se refiere a la propiedad que presentan algunos compuestos, particularmente los orgánicos, de poseer la misma fórmula molecular, pero distinta desarrollada y por lo tanto características diferentes

TIPOS DE ISÓMEROS

Isomería estructural o Constitucional

Mismos átomos pero diferentes conectividad (difieren en el orden en el que se enlazan los átomos en la molécula)

Isomería de cadena

Isomería de posición

Isomería de función

Isomería espacial o estereoisomería

Mismos átomos, misma conectividad, pero enlazados covalentemente con diferente orientación espacial.

Configuracional:
(no son interconvertibles)

Isomería geométrica o cis-trans
E-Z

Isomería Óptica
(R_S; L-D ; + -)

Isomería conformacional: (se interconvierten mediante rotaciones de enlaces sencillos)



ISÓMEROS ESTRUCTURALES

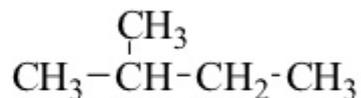
- Las moléculas con la misma fórmula molecular, tienen una diferente distribución de los enlaces entre sus átomos.
- Se pueden presentar 3 diferentes modos de isomería estructural:
 - de **CADENA**.
 - de **POSICIÓN**.
 - de **FUNCIÓN**.

ISÓMEROS DE CADENA

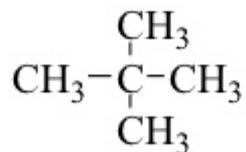
Los compuestos tienen distribuidos los átomos de carbonos de la molécula de forma diferente. Por ejemplo, existen 3 isómeros de fórmula general C_5H_{12} .



pentano



**2-metilbutano
(isopentano)**



**2,2-dimetilpropano
(neopentano)**

ISÓMEROS DE POSICIÓN

- Aquellos que dependen de la localización de los puntos funcionales o insaturaciones.

1.	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH=CH-CH}_3$	2-Peteno	C_5H_{10}
2.	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH=CH}_2$	1-Peteno	C_5H_{10}
3.	$\text{CH}_2\text{=CH-CH}_2\text{-CH=CH-CH}_3$	1,4-Hexadieno	C_6H_{10}
4.	$\text{CH}_2\text{=CH-CH=CH-CH}_2\text{-CH}_3$	1,3-Hexadieno	C_6H_{10}
5.	$\text{CH}_2\text{=C=CH-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$	1,2-Hexadieno	C_6H_{10}
6.	$\text{CH}_3\text{-CH=CH-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$	2-Hexeno	C_6H_{12}

ISÓMEROS DE FUNCIÓN

Son compuestos de igual fórmula molecular que presentan funciones químicas diferentes.





ISÓMEROS ESPACIALES o ESTEREOISÓMEROS

- Tienen fórmulas moleculares idénticas y sus átomos presentan la misma distribución:
 - la misma forma de la cadena...
 - los mismos grupos funcionales y sustituyentes...
 - situados en la misma posición...
- Pero su **disposición en el espacio es distinta**, o sea, **difieren en la orientación espacial de sus átomos...**

¡Es necesario representarlos en el espacio (o en 3-D) para visualizar las diferencias!

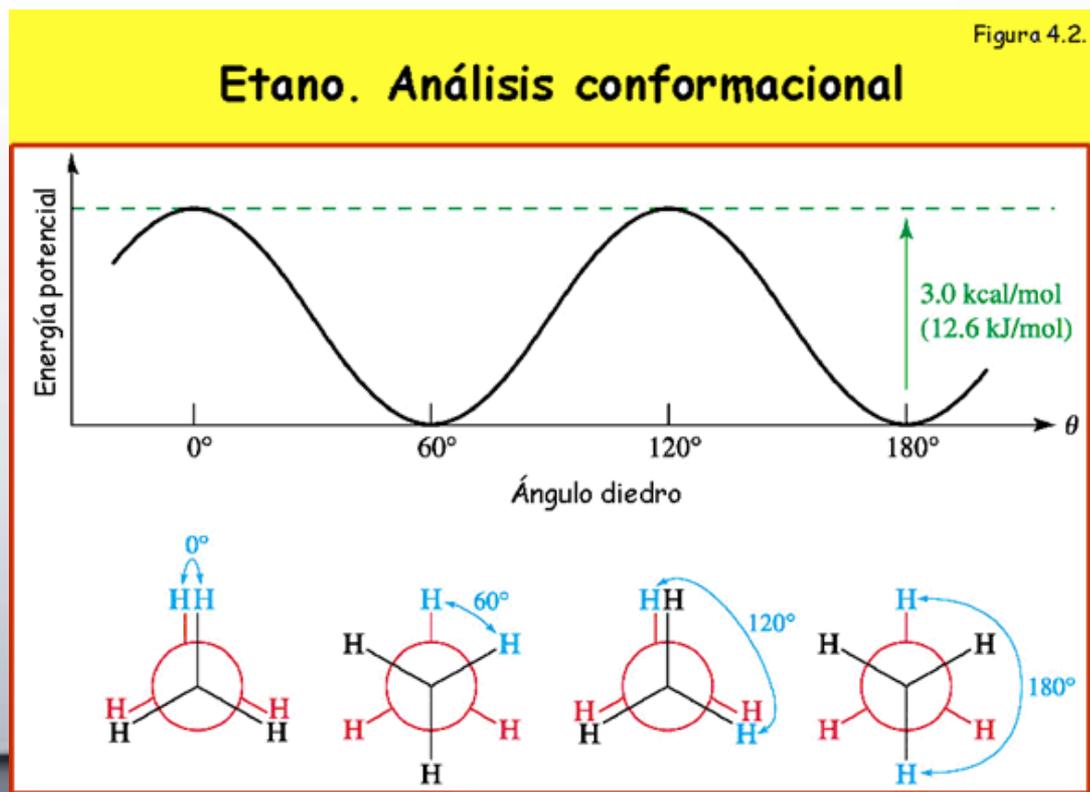


ESTEREOISÓMEROS CONFORMACIONALES

- La **conversión de una forma en otra es posible** pues la rotación en torno al eje del enlace formado por los átomos de carbono es más o menos libre.
- Reciben el nombre de **confórmeros** o **rotámeros**.
- Si los grupos son voluminosos podría haber impedimento estérico y no ser tan fácil la interconversión entre rotámeros.
- Los isómeros conformacionales generalmente **no son separables o aislables**.

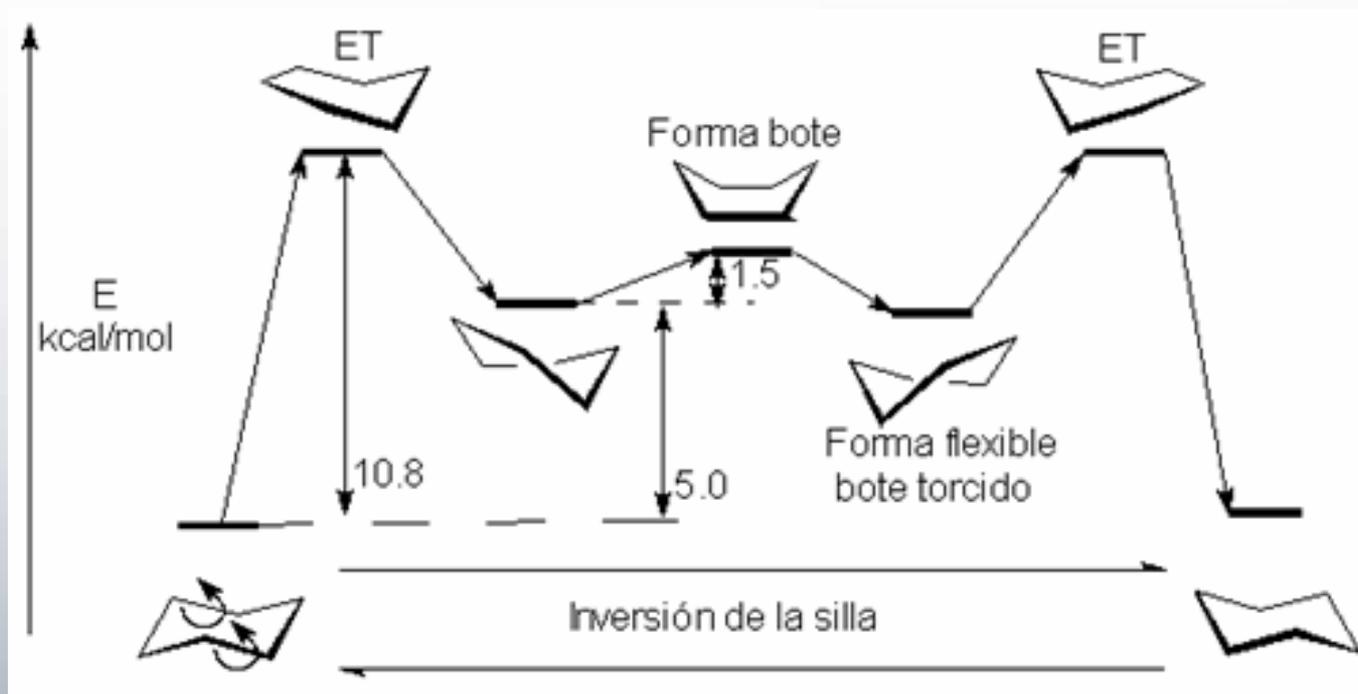
ESTEREOISÓMEROS CONFORMACIONALES

- EJEMPLOS:
 - Formas «eclipsada» y «alternada» del etano.



ESTEREOISÓMEROS CONFORMACIONALES

- EJEMPLOS:
 - Formas de «silla» y «bote» del ciclohexano.





ESTEREOISÓMEROS CONFIGURACIONALES

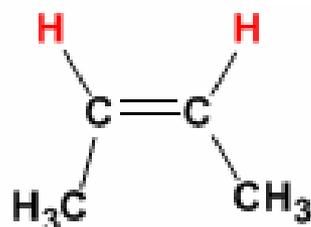
- No basta una simple rotación para convertir una forma en otra y aunque la disposición espacial es la misma, los isómeros **no son interconvertibles**.
- Los isómeros configuracionales **son aislables**, ya que es necesaria una gran cantidad de energía para interconvertirlos (se requiere energía necesaria para la ruptura de enlaces).
- Se divide en:
 - isomería **geométrica**
 - isomería **óptica**.



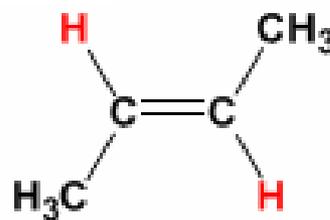
ISÓMEROS GEOMÉTRICOS

- Se produce cuando hay dos carbonos unidos con doble enlace o en compuestos cíclicos.
- No se presenta isomería geométrica ligada a los enlaces triples o sencillos.
- Los sustituyentes sobre cada uno de los carbonos implicados en el doble enlace necesariamente tienen que ser distintos para que haya isomería geométrica
- A las dos posibilidades se las denomina:
 - **Forma Cis o Trans**
 - **Forma Z o E**
- No se pueden interconvertir entre sí estas dos formas de un modo espontáneo, pues el doble enlace o el ciclo impiden la rotación.

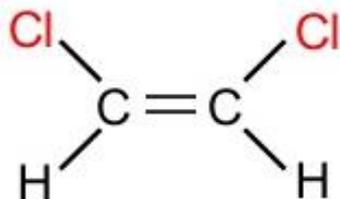
Isomería geométrica



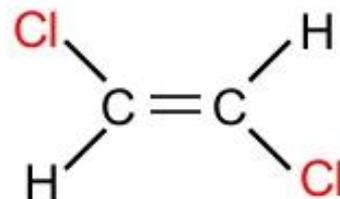
cis-2-Buteno



trans-2-Buteno



Forma **CIS**



Forma **TRANS**

En la forma **CIS** los sustituyentes iguales de los dos átomos de carbono afectados por el doble enlace se encuentran a un mismo lado de la línea del doble enlace, en la forma **TRANS** los sustituyentes están a uno y otro lado del doble enlace.

ISOMERÍA GEOMÉTRICA

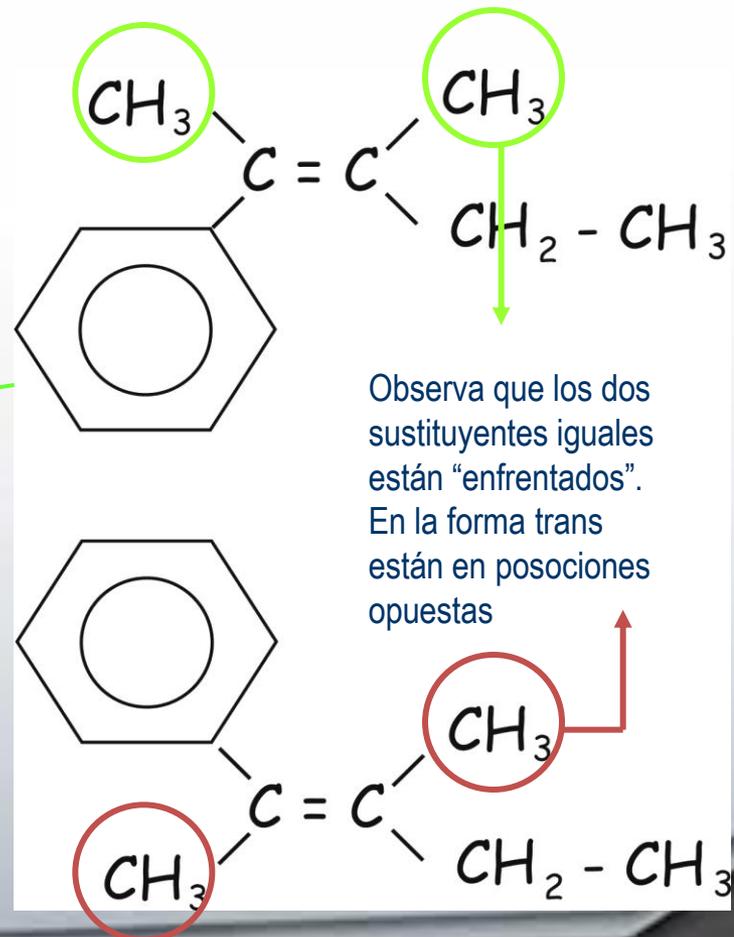
- También Z y E
- Causa: RIGIDEZ DEL DOBLE ENLACE

Z (zusammen, juntos)

E (entgegen, opuestos)

Por cierto, el compuesto es:

(Z o E)-2-fenil-3-metil-2-penteno

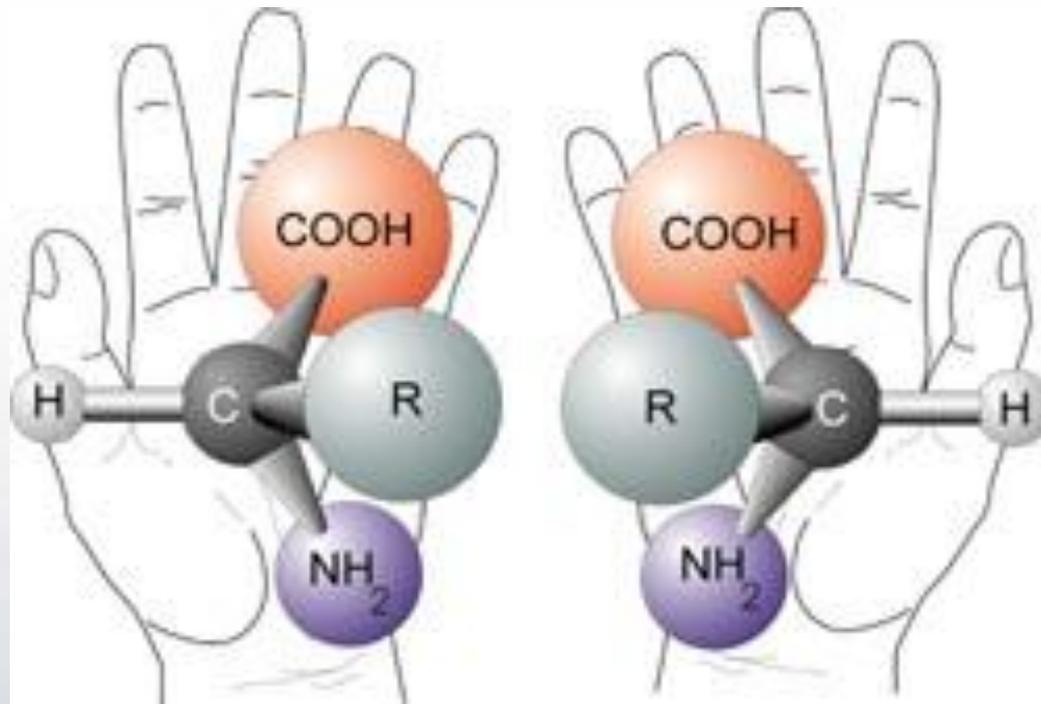




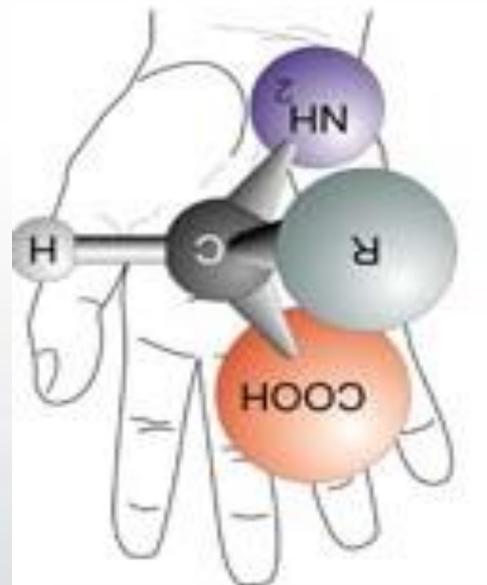
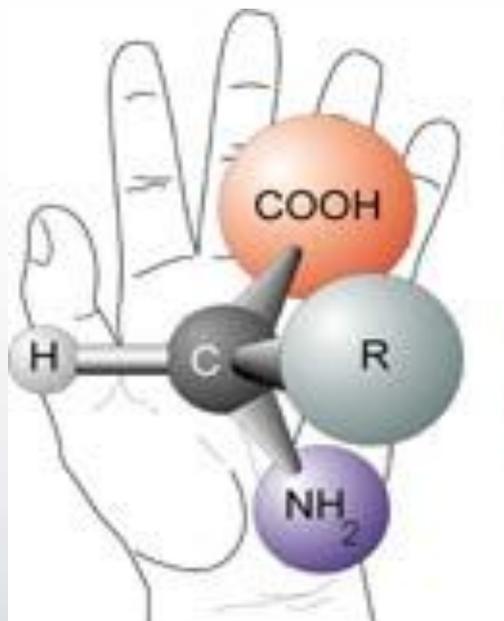
ESTEREOISÓMEROS ÓPTICOS

- Cuando un compuesto tiene al menos un átomo de **carbono asimétrico** ó **quiral**, es decir, un átomo de carbono con cuatro sustituyentes diferentes, pueden formarse dos isómeros distintos llamados estereoisómeros ópticos, o enantiómeros
- Todos los átomos están en la misma posición y enlazados de igual manera, entonces...

ESTEREOISÓMEROS ÓPTICOS



CARBONO QUIRAL: un átomo de carbono con cuatro sustituyentes diferentes





ESTEREOISÓMEROS ÓPTICOS

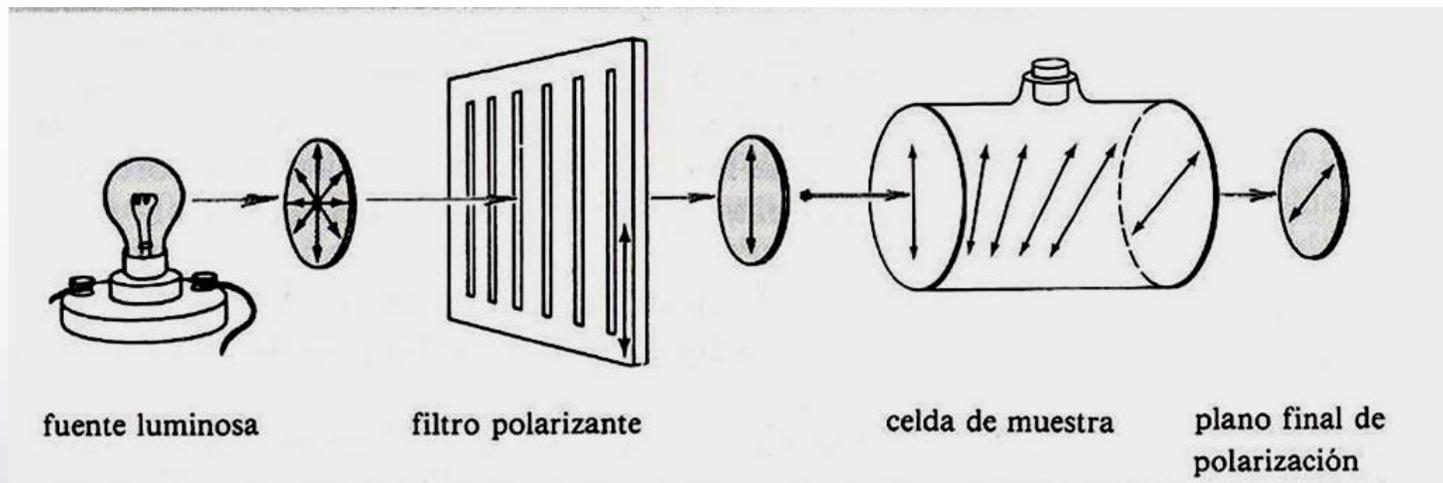
- **Los isómeros ópticos no se pueden superponer y uno es como la imagen especular del otro.**
- Presentan las **mismas propiedades físicas y químicas** pero se diferencian en que desvían el plano de la luz polarizada en diferente dirección
- Si una molécula tiene... **n átomos de C asimétricos**, tendrá un total de... **2^n isómeros ópticos.**



ESTEREOISÓMEROS ÓPTICOS

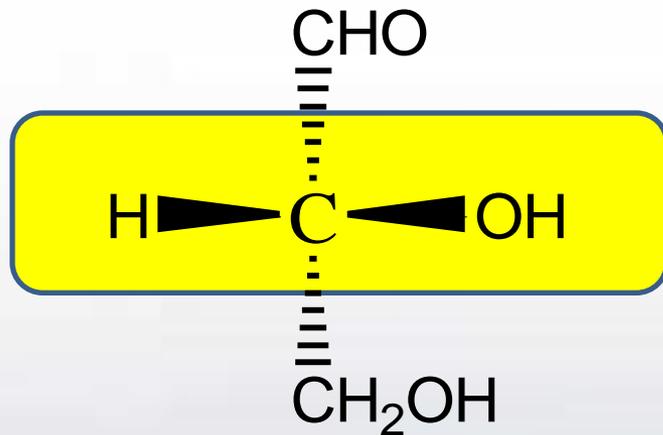
- Hay tres sistemas para nombrar estos compuestos:
 - **según la dirección de desviación del plano de la luz polarizada**, distinguimos las formas dextrógira (+) y levógira (-)
 - **según la nomenclatura D-L** (Formas D y L), que es inequívoca para isómeros con un solo carbono asimétrico
 - **según la configuración absoluta R-S** (formas R y S), más adecuada para moléculas con varios centros asimétricos

ESTEREOISÓMEROS ÓPTICOS (+ o -)

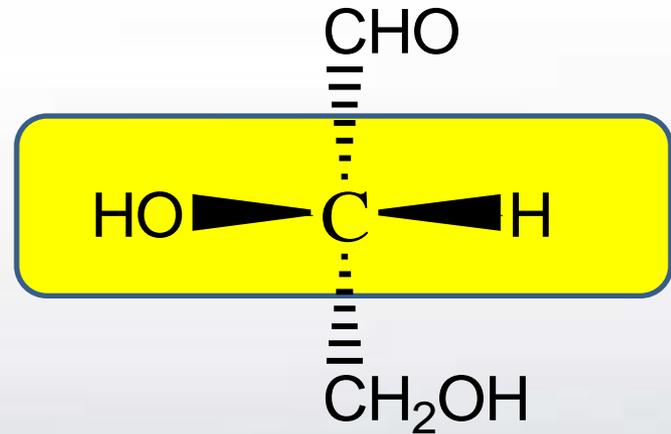


- Si desvía a la derecha, (+)
- Si desvía a la izquierda, (-)

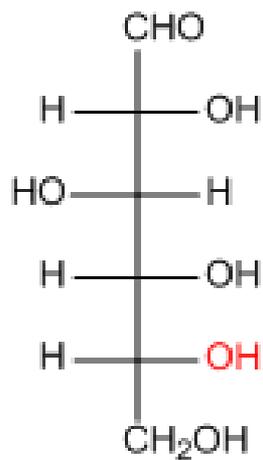
ESTEREOISÓMEROS ÓPTICOS (L o D)



D-gliceraldehido



L-gliceraldehido

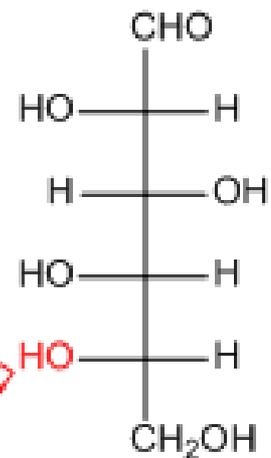


D-Glucosa



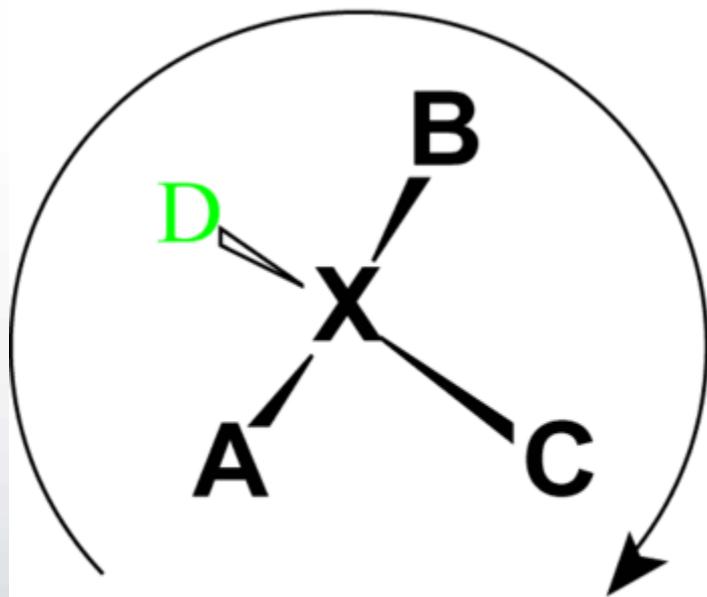
-OH derecha
Serie D

-OH izquierda
Serie L

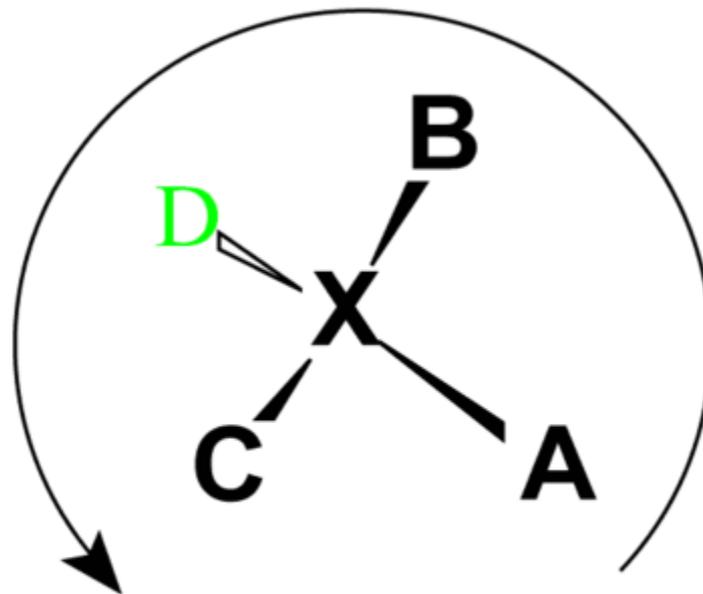


L-Glucosa

ESTEREOISÓMEROS ÓPTICOS



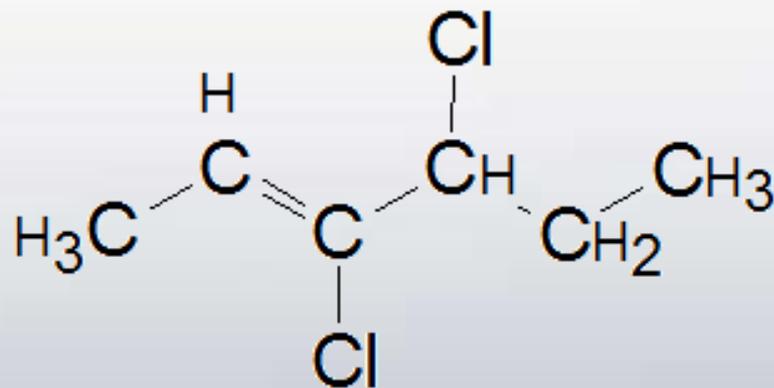
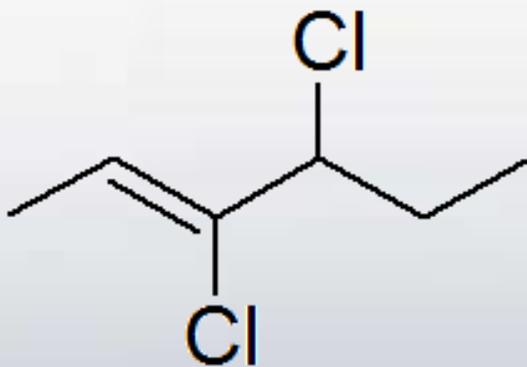
R



S

ESTEREOISÓMEROS ÓPTICOS

¿Cuántos isómeros ópticos tiene la siguiente molécula?
Sugerencia: indique los C quirales...





Reglas para determinar isomería óptica:

Para determinar la configuración de un carbono **hay que seguir ciertas reglas.**

Al igual que en el caso de la isomería geométrica (nomenclatura E-Z), **se jerarquizan los cuatro sustituyentes** del carbono asimétrico usando el mismo criterio (número atómico decreciente):

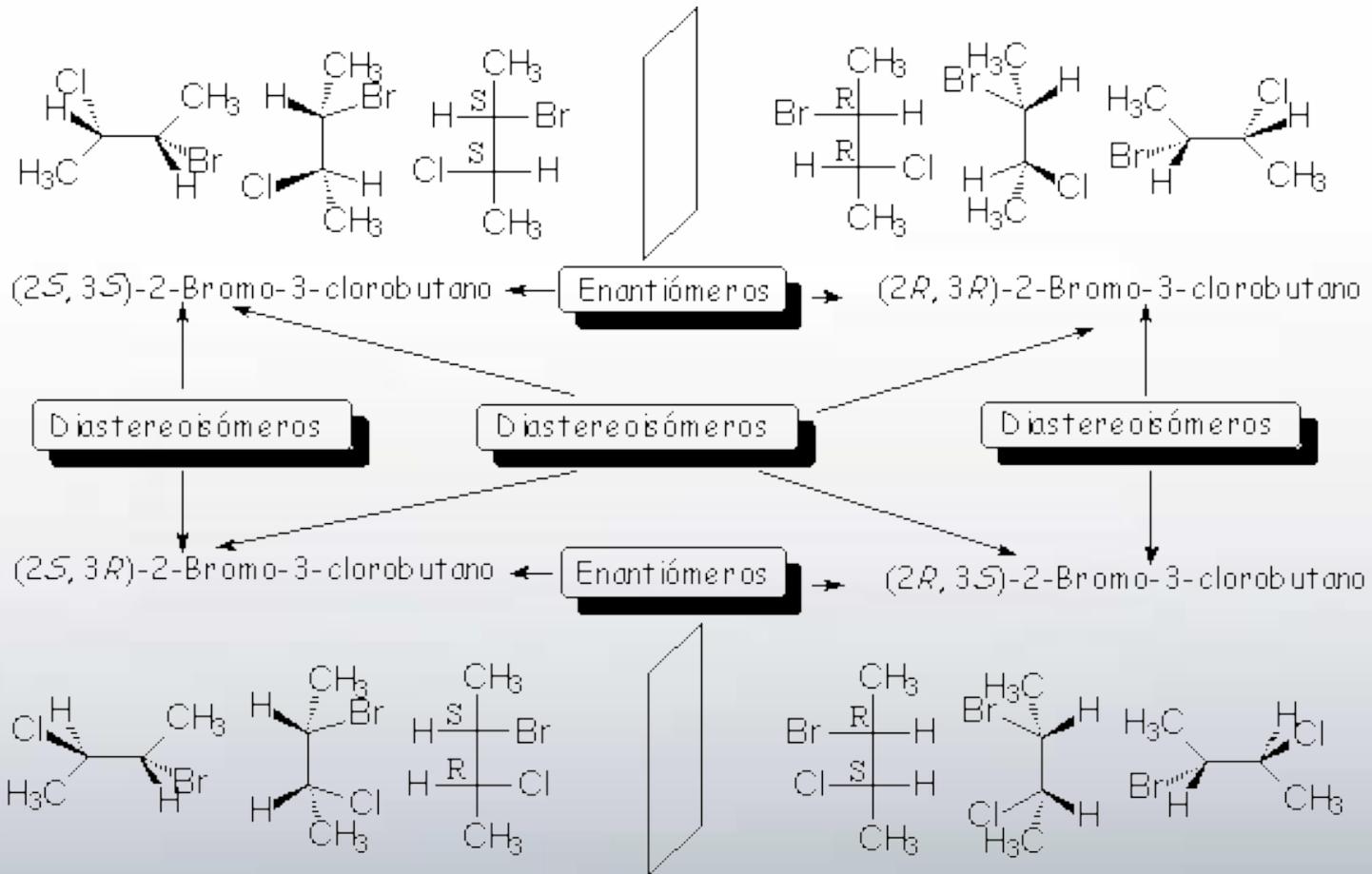
Reglas para determinar isomería óptica: (Reglas de Canh Ingold Prelog)

- 1º.- Se ordenan los cuatro grupos sustituyentes del carbono asimétrico por orden decreciente de número atómico de los átomos enlazados directamente con dicho carbono.
- 2º.- Si dos o más de estos átomos son iguales se recurre a considerar los átomos unidos a ellos con el mismo criterio de preferencia.
- 3º.- Si la ambigüedad persiste, se atiende al tipo de enlace que une los átomos en cuestión y se da preferencia al enlace triple sobre el doble y al doble sobre el sencillo.

Reglas para determinar isomería óptica:

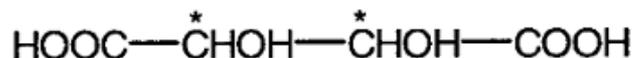
- Una vez establecido el orden de prioridad es preciso **orientar la molécula** en el espacio.
- El tetraedro correspondiente al carbono asimétrico se orienta de modo que **el sustituyente de menor categoría** (el número cuatro) ocupe el vértice **más alejado del observador**.
- De esta forma, los otros tres formarán una cara triangular frente al espectador.
- Al recorrer esta cara en el orden $1^{\circ} \rightarrow 2^{\circ} \rightarrow 3^{\circ}$, el recorrido podrá ser:
- **hacia la derecha** (en sentido horario). En este caso se tratará del **isómero R** (*rectum* = derecha)
- **hacia la izquierda** (sentido antihorario). En este caso se tratará del **isómero S** (*sinister* = izquierda)

Diastereoisómeros y enantiómeros

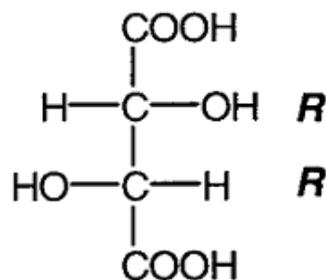


Compuestos meso

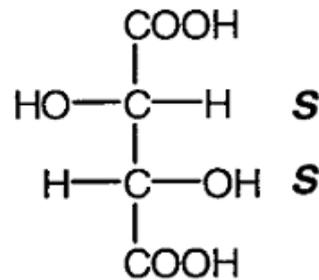
Cuando en una molécula existen *centros estereogénicos constitucionalmente iguales* el número de estereoisómeros disminuye y además algunos son *compuestos* o *formas meso*. El caso más sencillo se puede estudiar con los ácidos 2,3-dihidrobutanodioicos o ácidos tartáricos en cuya constitución,



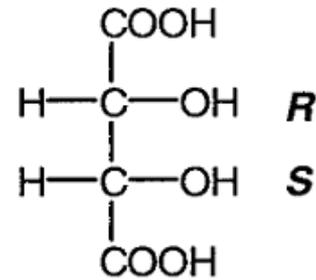
hay dos átomos de carbono asimétricos que tienen los *mismos sustituyentes* que, en orden de menor a mayor prioridad, son: un átomo de hidrógeno, el agrupamiento $-\text{CHOH}-\text{COOH}$, un grupo carboxilo y un grupo hidroxilo. Como cada centro quiral puede ser *R* o *S* y ambos son constitucionalmente idénticos el número estereoisómeros posibles se reduce a tres: (*R,R*), (*S,S*) y (*R,S*) pues este último y el (*S,R*) son el mismo compuesto. En proyección de Fischer, los tres estereoisómeros son:



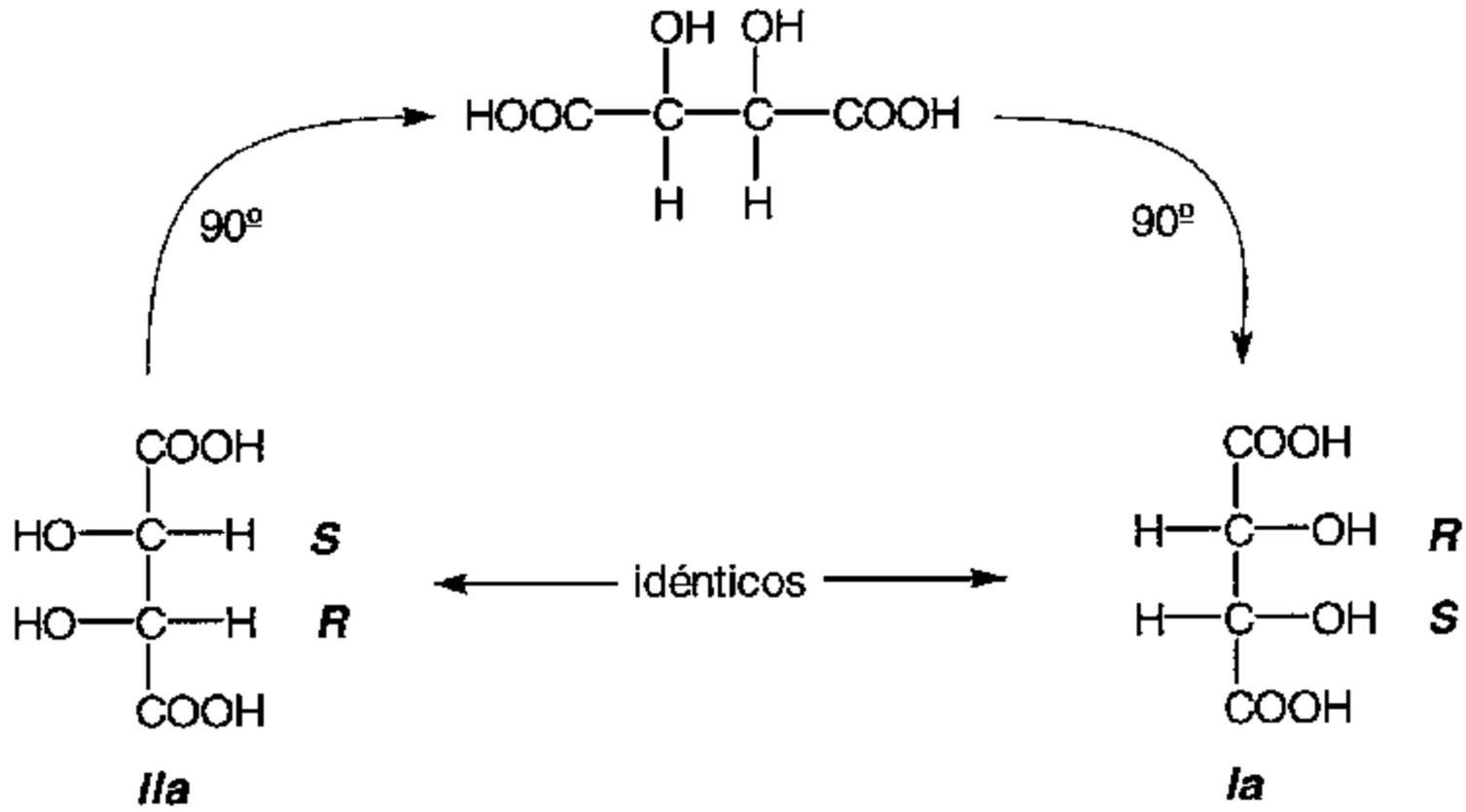
IIIa



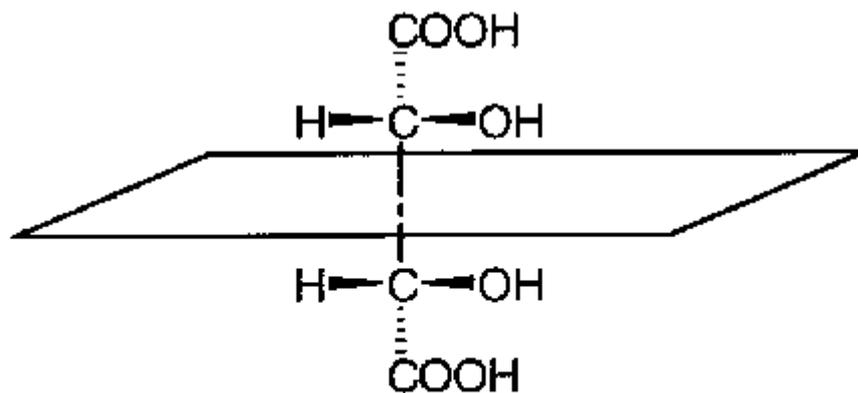
IVa



Ia

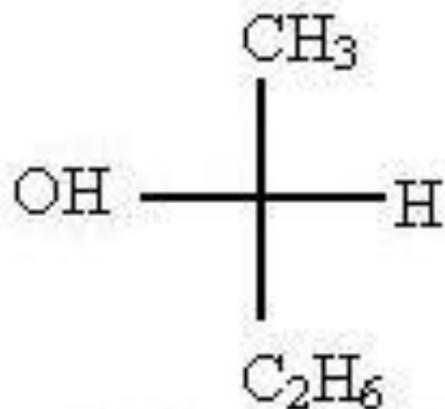


La ausencia de quiralidad se debe a la simetría de la molécula, aunque la ausencia del plano de simetría no garantiza que sea quiral. En el caso de este compuesto el plano de simetría pasa por el centro del enlace del carbono 2 y 3.



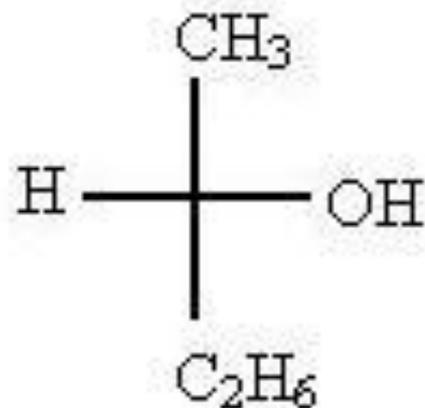
Otra forma fácil de reconocer los compuestos meso es que si miramos el plano de simetría la mitad superior del plano es imagen especular de la inferior.

Analicemos el ejemplo en clase:



(d)-2-butanol
(+)-2-butanol

(R)-2-butanol



(l)-2-butanol
(-)-2-butanol

(S)-2-butanol



gracias
POR SU ATENCIÓN