

Isomería

La isomería es una propiedad de ciertos compuestos moleculares que teniendo la misma fórmula molecular, tienen distinta estructura molecular, y por lo tanto tienen propiedades distintas.

Es importante en química orgánica (poco en inorgánica aunque puede ocurrir en algunos compuestos), y se apoya y está relacionada con ideas de geometría molecular en los átomos de C y sus hibridaciones.

Para trabajar la isomería es requisito conocer formulación y nomenclatura de orgánica, y nombrar isómeros supone un añadido adicional a formular y nombrar en ciertos casos.



Isomería y geometría molecular

La isomería está relacionada con de la geometría molecular, pero no se trata hasta Química 2º Bachillerato.

Se ven ideas básicas cualitativas, y son útiles modelos atómicos en 3D:

- El carbono tiene 4 enlaces
 - Si uno es triple y otro simple, forman 180° entre sí.
 - Si los dos son dobles, forman 180° entre sí.
 - Si uno es doble y 2 simples, forman 120° , los tres están en el mismo plano.
 - Si los 4 son simples, forman 109° (el carbono está en el centro de un tetraedro). **No están en el mismo plano, luego no es inmediato representarlos en dibujos en 2D.**



Tipos de isomería

En química orgánica hay 2 grandes tipos de isomerías, que a su vez tienen subtipos.

1. Isomería **estructural** o constitucional: las moléculas tienen distinta distribución de enlaces entre sus átomos.
 1. Isomería de cadena
 2. Isomería de posición
 3. Isomería de función
2. Isomería **espacial o esteroisomería**: mismo número, tipo de enlaces y grupos funcionales, pero una disposición espacial de los enlaces distinta.
 1. Isomería cis-trans (no usar geométrica, desaconsejado por IUPAC)
 2. Isomería óptica (a su vez tiene subtipos)



Resumen gráfico. Usa “geométrica”, desaconsejado por IUPAC

A BRIEF GUIDE TO

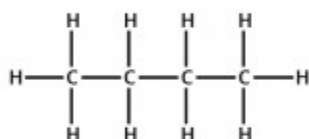
• TYPES OF ISOMERISM IN ORGANIC CHEMISTRY •

A GUIDE TO THE FIVE MAIN TYPES OF ISOMERISM THAT CAN BE EXHIBITED BY ORGANIC COMPOUNDS

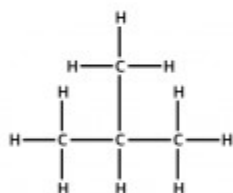
AN ISOMER OF A MOLECULE IS A MOLECULE WITH THE **SAME MOLECULAR FORMULA** BUT A **DIFFERENT STRUCTURAL OR SPATIAL ARRANGEMENT** OF ATOMS. THIS VARIATION CAN LEAD TO A DIFFERENCE IN PHYSICAL OR CHEMICAL PROPERTIES.

STRUCTURAL ISOMERISM

CHAIN



BUTANE

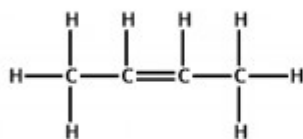


2-METHYL PROPANE

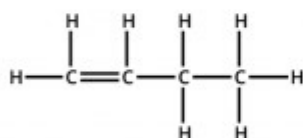
DIFFERENT ARRANGEMENT OF A MOLECULE'S CARBON SKELETON

The positions of the carbon atoms in the molecule can be rearranged to give 'branched' carbon chains coming off the main chain. The name of the molecule changes to reflect this, but the molecular formula is still the same.

POSITION



BUT-2-ENE

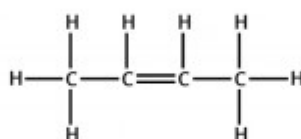


BUT-1-ENE

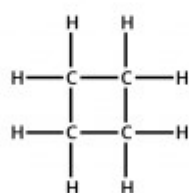
THE DIFFERING POSITION OF THE SAME FUNCTIONAL GROUP IN THE MOLECULE

The molecular formula remains the same; the type of functional group also remains the same, but its position in the molecule changes. The name of the molecule changes to reflect the new position of the functional group.

FUNCTIONAL



BUT-2-ENE



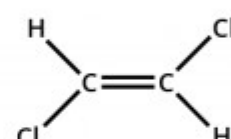
CYCLOBUTANE

DIFFERING POSITIONS OF ATOMS GIVE A DIFFERENT FUNCTIONAL GROUP

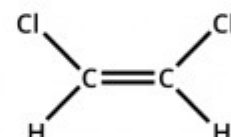
Also referred to as functional group isomerism, these isomers have the same molecular formula but the atoms are rearranged to give a different functional group. The name of the molecule changes to reflect the new functional group.

STEREISOMERISM

GEOMETRIC



(E)-1,2-DICHLOROETHENE
E = opposite side

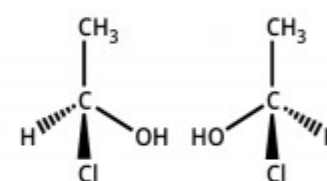


(Z)-1,2-DICHLOROETHENE
Z = same side

DIFFERENT SUBSTITUENTS AROUND A BOND WITH RESTRICTED ROTATION

Commonly exhibited by alkenes, the presence of two different substituents on both carbon atoms at either end of the double bond can give rise to two different, non-superimposable isomers due to the restricted rotation of the bond.

OPTICAL



L: (S)-1-CHLOROETHANOL
R: (R)-1-CHLOROETHANOL



NON-SUPERIMPOSABLE MIRROR IMAGES OF THE SAME MOLECULE

Optical isomers differ by the placement of different substituents, around one or more atoms in a molecule. Different arrangements of these substituents can be impossible to superimpose - these are optical isomers.



Isomería estructural: cadena

Distinto esqueleto carbonado, las cadenas tienen distintos niveles de ramificación o distintas longitudes de radicales.

Básicamente son hidrocarburos, aunque pueden ser variaciones en cadenas de hidrocarburos con grupos funcionales iguales. Ejemplos:

C_5H_{12} : $CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3$ (pentano), $CH_3-CH(CH_3)-CH_2-CH_3$ (metilbutano) y $CH_3-C(CH_3)_2-CH_3$ (dimetilpropano o neopentano)

C_5OH_{12} : $CH_3-(CH_2)_3-CH_2OH$ (pentan-1-ol), $CH_3-CH(CH_3)-CH_2-CH_2OH$ (3-metilbutan-1-ol) y $CH_3-C(CH_3)_2-CH_2OH$ (2,2-dimetilpropanol)

$C_4O_2H_8$: $HCOO-CH_2-CH_2-CH_3$ (metanoato de propilo), $CH_3-COO-CH_2-CH_3$ (etanoato de etilo) (A veces este caso se considera como de posición)

>Ver comentario notación metanoato vs ácido ($HCOO-$ vs $-COOH$)



Isomería estructural: posición

Mismo esqueleto carbonado pero distinta posición del mismo grupo funcional. Implica no ser hidrocarburo simple (puede ser alqueno variando posición del doble enlace). Ejemplos:

C_5OH_{12} : $CH_3-(CH_2)_3-CH_2OH$ (pentan-1-ol), $CH_3-(CH_2)_2-CHOH-CH_3$ (pentan-2-ol) y $CH_3-CH_2-CHOH-CH_2-CH_3$ (pentan-3-ol)

C_5BrH_{11} : $CH_3-(CH_2)_3-CH_2Br$ (1-bromopentano), $CH_3-(CH_2)_2-CHBr-CH_3$ (2-bromopentano) y $CH_3-CH_2-CHBr-CH_2-CH_3$ (3-bromopentano)

Variantes en un benceno (orto, meta y para) o en un ciclo con los mismos sustituyentes, por ejemplo o-xileno, m-xileno y p-xileno (dimetilbenceno).



Isomería estructural: función

Con los mismos átomos en la molécula se tiene grupos funcionales distintos. Por su similitud muchas veces van asociados aldehídos con cetonas, alcoholes con éteres, y ácidos con ésteres.

Cambiar ciclo por doble no es de cadena, es de función.

Ejemplos:

C_6H_{12} : (Ciclohexano), $CH_3-(CH_2)_3-CH=CH_2$ (hex-1-eno)

C_3OH_5 : CH_3-CH_2-CHO (propanal, grupo aldehído), $CH_3-CO-CH_3$ (propanona, grupo cetona)

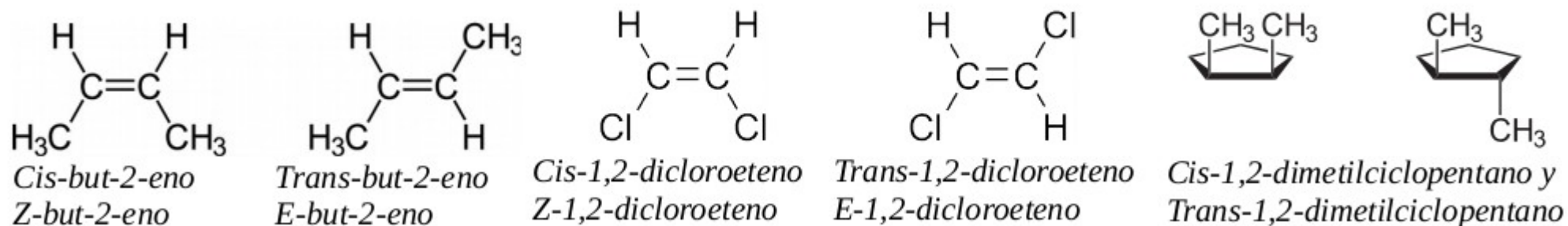
C_3OH_8 : $CH_3-CH_2-CH_2OH$ (propan-1-ol, grupo alcohol), $CH_3-CH_2-O-CH_3$ (etilmetiléter, grupo éter)

C_3OH_6 : CH_3-CH_2-COOH (ácido propanoico, grupo ácido), $CH_3-COO-CH_3$ (etanoato de metilo, grupo éster)



Isomería espacial: cis-trans

Asociada a **dobles enlaces o ciclos** que tienen distintos sustituyentes respecto a un plano. Como el doble enlace y el ciclo no permiten rotar, no hay conversión entre los dos isómeros. Es necesario que los C del doble enlace o ciclo tengan sustituyentes distintos, y de manera sencilla se asume que ambos C tienen los dos grupos idénticos, y se utiliza la nomenclatura **cis** cuando los sustituyentes iguales están en el mismo lado, y **trans** cuando los sustituyentes iguales están en lados opuestos.



Cuando hay sustituyentes distintos la nomenclatura cis-trans no basta, y se usa la nomenclatura genérica Z-E (Zusammen “junto”, Entgegen “opuesto”) para indicar si los grupos más prioritarios están al mismo lado. *Asignar prioridad se hace con reglas CIP (Cahn-Ingold-Prelog), no en Bachillerato.*

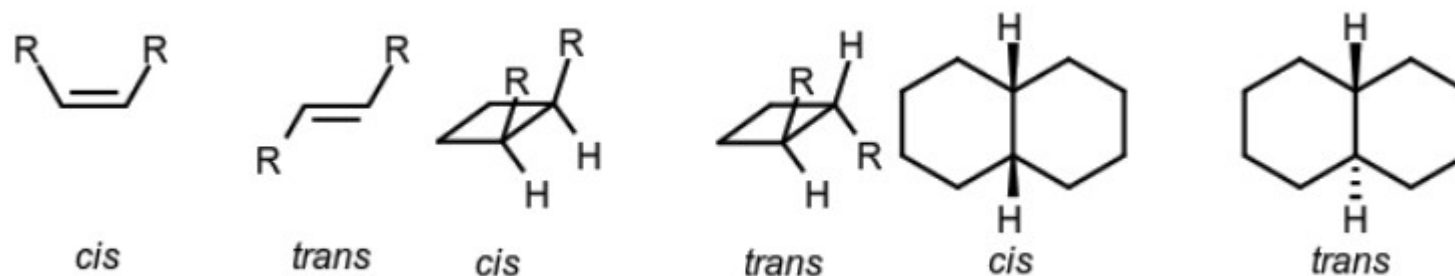


Isomería espacial: cis-trans (extra)

En los casos en los que se puede usar cis-trans, también es válido usar Z-E, pero hay casos donde se usa Z-E sin ser posible cis-trans.

Es importante al representar alquenos y ciclos tener presente geometría, o se pueden omitir isómeros. No usar rectas sino ángulos (120° , 109° , puede estar forzado, por ejemplo hay ciclopropano), y tener presente que enlace triple es lineal y representarlo recto, mínimo ciclo estable es cicloheptino.

Existen maneras de representar compuestos adicionales a la esquelética y semidesarrollada: proyección de Haworth para ciclos, Fischer carbohidratos.

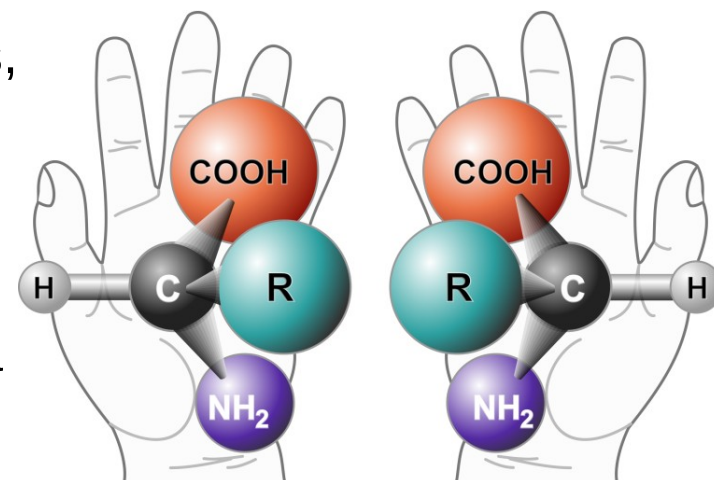


[IUPAC. Compendium of Chemical Terminology, cis-trans isomers](#)



Isomería espacial: óptica (I)

Está asociada a la existencia de carbonos quirales, que son carbonos que tienen 4 enlaces con los 4 sustituyentes distintos (se indican con C*). Al representar espacialmente los 4 sustituyentes de un C quiral, los dos isómeros ópticos son entre sí imágenes especulares, y no se puede obtener una por rotación de la otra, siendo la disposición espacial distinta.



Presentan las mismas propiedades salvo desviar la luz polarizada de manera distinta (de donde proviene el nombre de isómeros ópticos).

Hay dos subtipos:

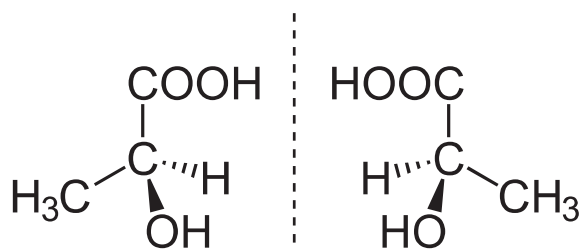
- enantiómeros, moléculas que son imágenes especulares no superponibles
- diastereoisómeros/diasteriómeros, isómeros ópticos no enantiómeros (asociado a que hay varios carbonos quirales).



Isomería espacial: óptica (II)

Representación bidimensional con perspectiva tridimensional: proyección de Natta.

Representar la disposición en 3 dimensiones de los 4 sustituyentes del carbono quiral supone representar el tetraedro asociado, en el que los 4 vértices serían los sustituyentes y el carbono quiral sería el centro. Para representar en 2 dimensiones, mediante líneas simples (C-COOH y C-CH₃ en el ejemplo) se indica que dos de los enlaces están en el plano del papel, y se usan símbolos especiales para los enlaces que “salen del papel” (línea negra gruesa con forma triangular, enlace C-OH en el ejemplo) y los que “entran en el papel” (línea discontinua gruesa “triangular”, enlace C-H en el ejemplo).



Ácido láctico (ác. 2-hidroxipropanoico)

