

# ISOMERÍA

Los isómeros son moléculas que tienen la misma fórmula molecular pero diferente estructura, y por tanto sus propiedades físicas y/o químicas son diferentes. Se clasifican en isómeros estructurales y estereoisómeros

- Los isómeros estructurales difieren en la forma de unión de sus átomos

Se clasifican en

- \* de cadena,
- \* de posición y
- \* de función.

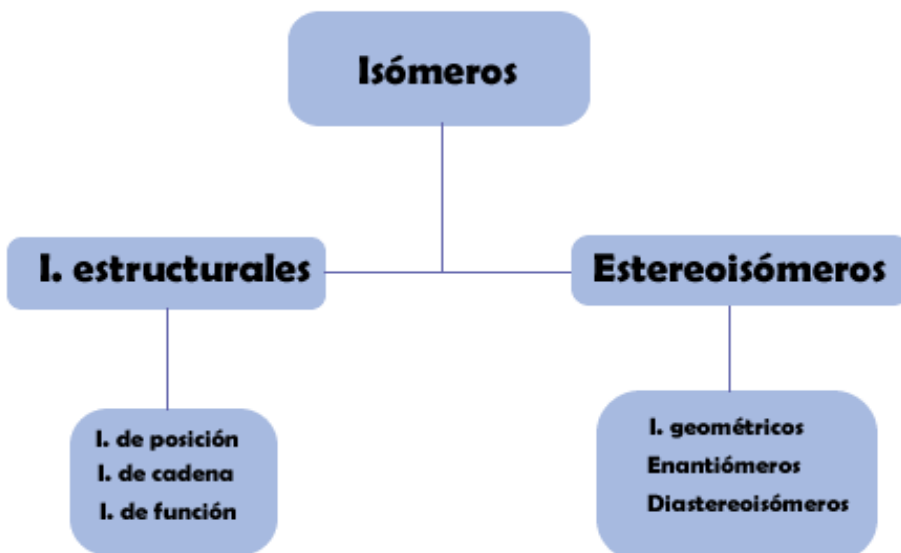
Pueden diferenciarse si se escriben sus formulas semidesarrolladas en el plano: si dos estructuras pueden transformarse una en la otra mediante giros en el plano no son isómeros, representarían la misma molécula.

- En los estereoisómeros los átomos están conectados de igual manera en ambas moléculas. La diferencia radica en la distinta orientación espacial de los átomos o grupos de átomos.

Para diferenciarlos es necesario dibujar o representar la molécula respetando los ángulos y orientaciones reales de los enlaces, por lo que a veces es necesario utilizar perspectivas o proyecciones

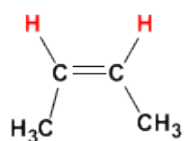
Se clasifican en

- \* Isómeros geométricos (cis-trans, Z-E),
- \* Isómeros ópticos enantiómeros y diastereoisómeros.

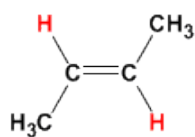


**La isomería cis-trans** o geométrica es debida a la rotación restringida en torno a un enlace carbono-carbono. Esta restricción puede ser debida a la presencia de dobles enlaces o ciclos.

Si los sustituyentes de cada carbono son diferentes, estos pueden disponerse de dos maneras:



cis-2-Buteno



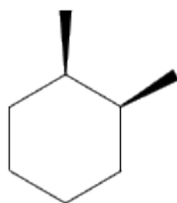
trans-2-Buteno

Así, el 2-buteno puede existir en forma de dos isómeros, llamados cis y trans.

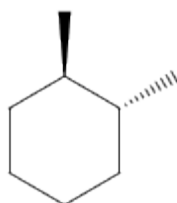
El isómero que tiene los hidrógenos al mismo lado se llama cis, y el que los tiene a lados opuestos trans.

Los compuestos cíclicos, debido a su rigidez, también presentan isomería geométrica.

Así, el 1,2-dimetilciclohexano puede existir en forma de dos isómeros. Se llama isómero cis el que tiene los hidrógenos al mismo lado y trans el que los tiene a lados opuestos.



cis-1,2-Dimetilciclohexano



trans-1,2-Dimetilciclohexano

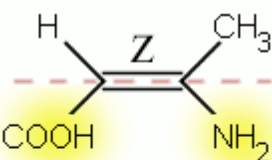
Este sistema *cis/trans* en alquenos es insuficiente cuando hay tres o más sustituyentes diferentes en el doble enlace. En estos casos se usa el sistema de nomenclatura *Z/E*, adoptado por la IUPAC, que sirve para todos los alquenos.

*Z* proviene del vocablo alemán *zusammen* que significa *juntos* y *E* del vocablo alemán *entgegen* que significa *opuesto*. Equivaldrían a los términos *cis* y *trans* respectivamente.

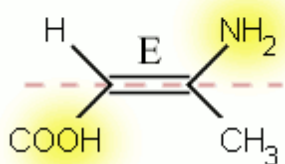
Para determinar si una configuración molecular es *Z* o *E*. ( que seguiremos llamando cis o trans)

- Para cada uno de los dos átomos de carbono del doble enlace se determina individualmente cual de los dos sustituyentes tiene la prioridad más alta (tiene mayor número atómico, si entre dos o más sustituyentes existe coincidencia en el número atómico del primer átomo se avanza en la cadena al siguiente átomo: propilo tiene mayor prioridad que etilo y este mayor que metilo, etc)

**Br > Cl > F > O > N > CH<sub>3</sub>—O — > CH<sub>3</sub>—CH<sub>2</sub>—CH<sub>2</sub>— > CH<sub>3</sub>—CH<sub>2</sub>— > CH<sub>3</sub>—**



Como ejemplo, en la imagen el ácido (*Z*)-3-amino-2-butenoico y el ácido (*E*)-3-amino-2-butenoico.



## Isomería óptica

### Quiralidad molecular y enantiómeros

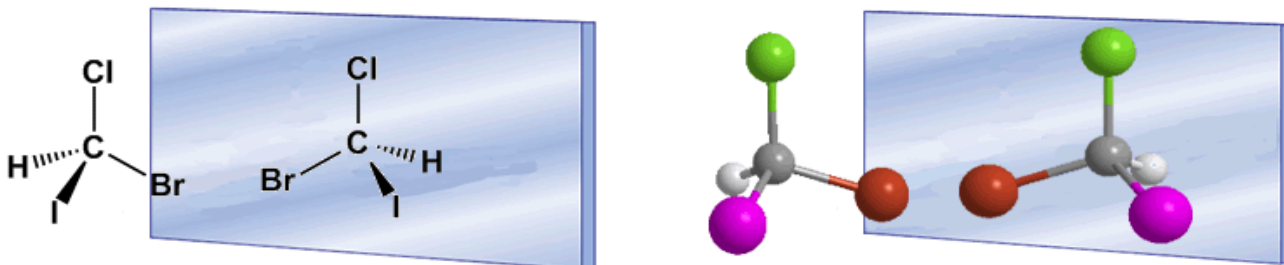
La palabra *quiral* fue introducida por William Thomson (Lord Kelvin) en 1894 para designar objetos que no son superponibles con su imagen especular. Aplicado a la química orgánica, podemos decir que una molécula es quiral cuando ella y su imagen en un espejo no son superponibles. La quiralidad está asociada a la presencia de carbonos asimétricos.

Un carbono asimétrico es aquel que se une a cuatro sustituyentes diferentes.

Los 4 enlaces simples de un carbono no están situados en un mismo plano, como pudiera pensarse al observar una fórmula semidesarrollada, sino que están dirigidos hacia los vértices de un tetraedro en cuyo centro está el átomo de carbono, los ángulos de enlace valen  $109,5^\circ$

Ejemplo: en la molécula de Bromocloroyodometano, el carbono está unido a bromo, cloro, yodo e hidrógeno, cuatro sustituyentes diferentes que lo convierten en quiral o asimétrico.

*La molécula y su imagen en un espejo son diferentes, ningún giro permite convertir una en la otra ni superponerlas.*



La relación entre dos moléculas que son imágenes especulares no superponibles es de **enantiómeros**.

Las dos enantiómeros tienen las mismas propiedades físicas excepto la interacción con la luz polarizada en un plano.

También tienen las mismas propiedades químicas, excepto si reaccionan con otras moléculas quirales. Por eso, presentan muy diferente actividad biológica ya que la mayoría de las moléculas presentes en los seres vivos son quirales. Por ejemplo, la R(-)adrenalina es más potente que la S(+)-adrenalina.<sup>4</sup>

### ¿Qué es luz polarizada?

La luz normal consiste en ondas electromagnéticas que vibran en todas las direcciones. Cuando la luz pasa a través de un polarizador (prisma de Nicol) las ondas electromagnéticas vibran en un plano. Este plano de oscilación coincide con el plano de propagación de la onda.

### Enantiómeros y la luz polarizada

Cuando la luz polarizada pasa a través de una cubeta que contiene una sustancia quiral, se produce una rotación en el plano de polarización.

**Las sustancias quirales rotan la luz polarizada y se dice de ellas que son ópticamente activas (presentan actividad óptica).**

Aquellas sustancias que no producen rotación en la luz polarizada son ópticamente inactivas.

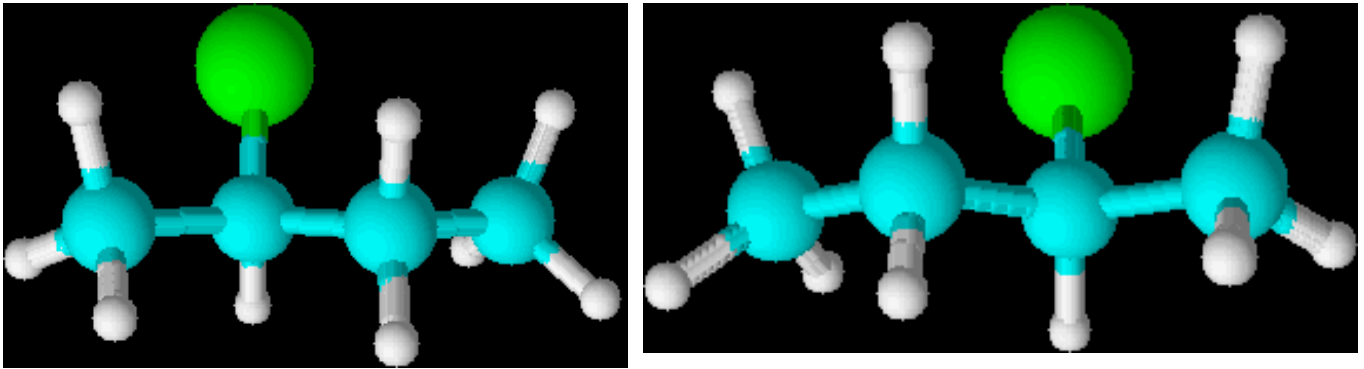
### Dextrógiro y levógiro

Cuando un compuesto ópticamente activo, rota la luz polarizada en el sentido de las agujas del reloj, se dice que es dextrógiro y se representa por (+). Las sustancias que rotan la luz en sentido contrario a las agujas del reloj, son levógiras y se representa por (-).

Los enantiómeros rotan la luz polarizada el mismo ángulo pero en sentidos opuestos. Mediante un polarímetro puede medirse dicho ángulo.

## Representación de moléculas quirales

### Modelo 3D de bolas y varillas



### “Perspectiva”

Los sustituyentes que quedan en el plano se dibujan con línea continua, Los grupos que salen hacia fuera del plano del papel (hacia nosotros) se representan como cuñas, y los que van hacia dentro del plano como líneas a trazos



Proyectar consiste en dibujar en dos dimensiones (plano) una molécula.

**Proyección de Fischer** la molécula se dibuja en forma de cruz con los sustituyentes que van al fondo del plano en la vertical y los grupos que salen hacia nosotros en la horizontal, el punto intersección de ambas líneas representa el carbono proyectado.



Aunque se acostumbra a dejar la cadena carbonada en la vertical, puede girarse la molécula de diferentes formas dando lugar a proyecciones de Fischer aparentemente diferentes, pero que en realidad representan la misma molécula.

Ahora haremos la proyección de una molécula con dos centros quirales

