

Tema 2.

ISOMERÍA

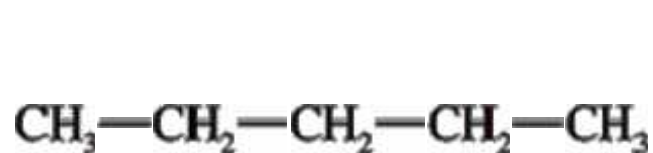
1. Isómeros Estructurales.

Se da en compuestos con la misma fórmula molecular pero con los átomos enlazados de distinta forma, en esta clasificación se distinguen los isómeros: **de cadena, de posición y de función.**

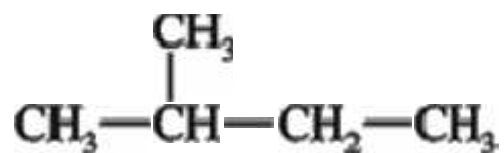
1.1. Isómeros de cadena.

Es la que presentan las sustancias cuyas fórmulas estructurales difieren únicamente en la disposición de los átomos de carbono en el esqueleto carbonado.

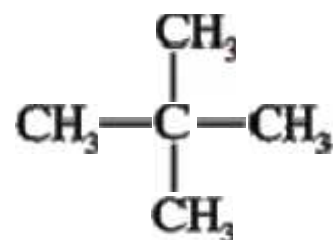
Ejemplo: isómeros de la fórmula C₅H₁₂



n-pentane, bp = 36°C



isopentane, bp = 28°C

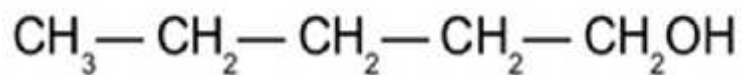


neopentane, bp = 10°C

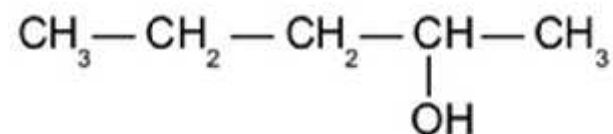
1.2. Isómeros de posición.

Es la que presentan sustancias cuyas fórmulas estructurales difieren únicamente en la situación de un grupo funcional sobre el esqueleto carbonado.

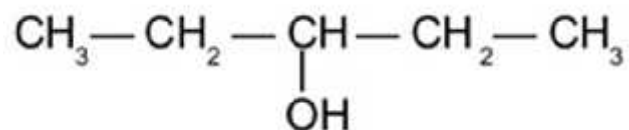
Ejemplo 1: isómeros de la fórmula $C_5H_{12}O$



1 – pentanol.

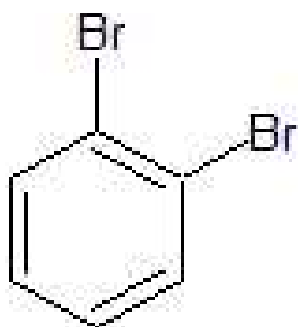


2 – pentanol.

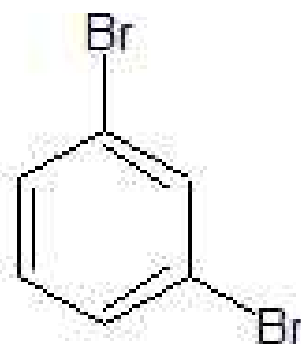


3 – pentanol.

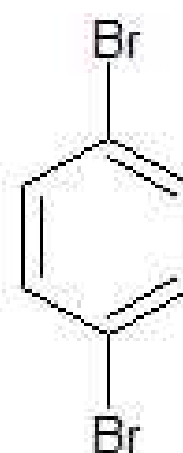
Ejemplo 2: isómeros de la fórmula $C_6H_4Br_2$



1,2-dibromobenceno



1,3-dibromobenceno

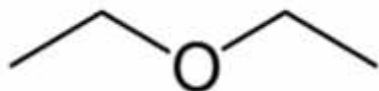


1,4-dibromobenceno

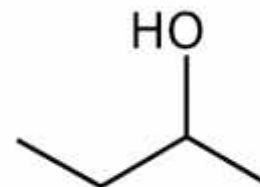
1.3. Isómeros de función.

Es la que presenta sustancias que con la misma fórmula molecular presentan distinto grupo funcional.

Ejemplo 1: isómeros de la fórmula $C_4H_{10}O$

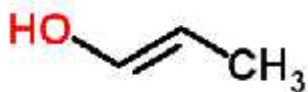


dietil éter



2 – butanol.

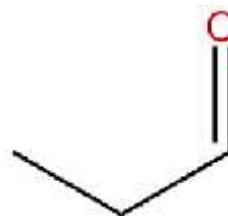
Ejemplo 2: isómeros de la fórmula C_3H_6O



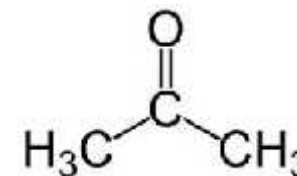
propenol.



ciclopropanol.



propanal.



propanona.

2. Isómeros Espacial.

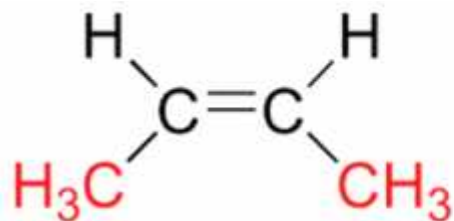
Se da en compuesto con la misma fórmula molecular y con átomos enlazados de igual forma pero con diferente posición espacial. En esta clasificación se distinguen los isómeros: **geométricos Cis - Trans, ópticos y conformacionales.**

2.1. Isómeros geométricos.

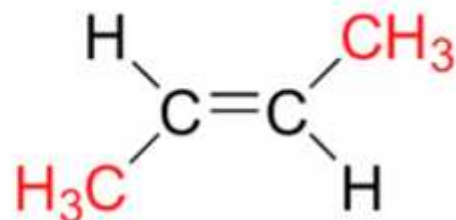
Se presenta en compuestos con **dobles enlaces**. Se debe a que no es posible la rotación libre alrededor del eje del doble enlace carbono – carbono, esto implica que cada uno de los átomos unidos al carbono están ubicados espacialmente en **distintos planos** (si un grupo está arriba el otro estará abajo; si un grupo está delante el otro hacia atrás). Por esto se les denomina formas Cis y Trans.

Ejemplos.

Los isómeros ***trans*** son más estables que los correspondientes ***cis***, porque los trans tienen menos interacciones estéricas (influencias grupo a grupo) desestabilizantes de éstos. Así las formas cis y trans, son distintas configuraciones de la misma estructura, es decir, disposiciones espaciales diferentes y estables que resultan ser **isómeros separables**.

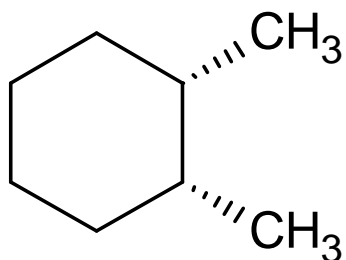


cis-2-butene

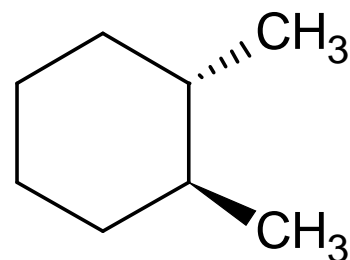


trans-2-butene

En los ciclos también funciona como enlace doble.



cis – 1,2 – dimetilciclohexano



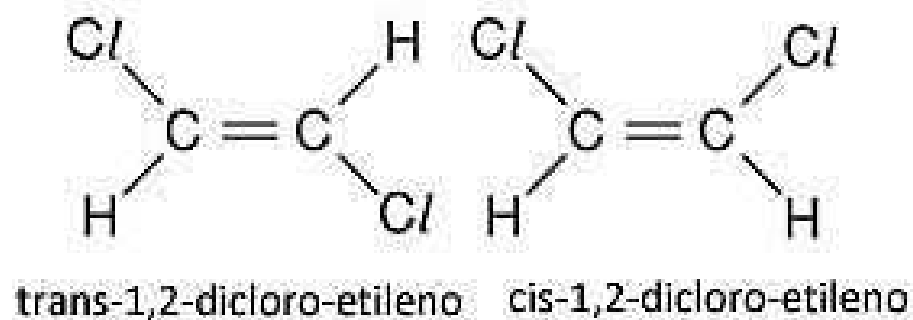
trans – 1,2 – dimetilciclohexano

Los isómeros Cis – Trans son separables ya que tienen distintas características físico químicas.

Ejemplos del efecto de la isomería geométrica sobre las propiedades físicas.

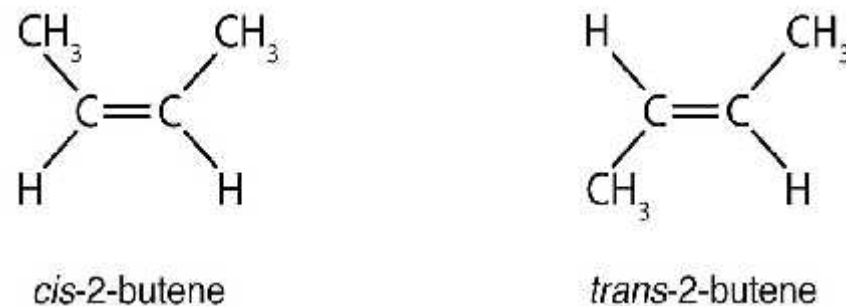
Ejemplo 1: 1,2 – dicloroeteno.

Isómero	Punto de Fusión (°C)	Punto de Ebullición (°C)
Cis	-80	60
Trans	-50	48



Ejemplo 2: 2 – buteno.

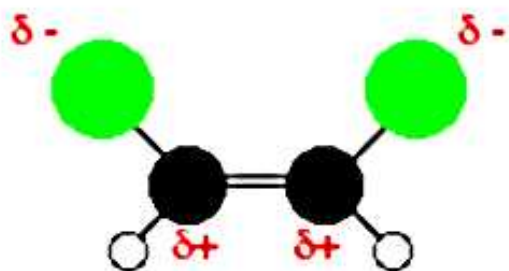
Isómero	Punto de Fusión (°C)	Punto de Ebullición (°C)
Cis	-139	4
Trans	-106	1



CONCLUSIÓN.

- El isómero cis tiene un punto de ebullición más alto que el isómero trans.
- El isómero cis tiene el punto de fusión más bajo que el isómero trans.

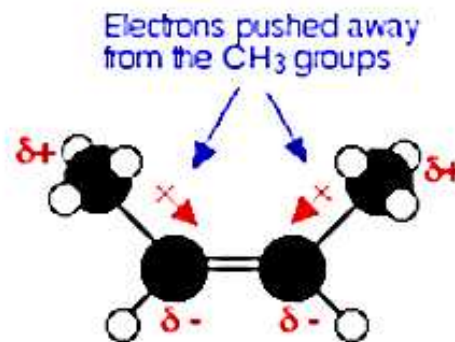
¿POR QUÉ EL ISÓMERO CIS TIENE MAYOR PUNTO DE EBULLICIÓN?



cis-1,2-dicloroeteno

El átomo de Cloro tira los electrones de enlace polarizando la unión C – Cl.

El isómero cis es polar.



cis-2-buteno

Los grupos metilos empujan los electrones hacia el carbono del doble enlace polarizando el enlace C – C.

¿POR QUÉ EL ISÓMERO CIS TIENE MENOR PUNTO DE FUSIÓN?

La forma en U del isómero cis dificulta el empaquetamiento en estado sólido. Las débiles fuerzas intermoleculares que se establecen en este caso explican que funde a menores temperaturas que el isómero trans, cuya forma permite un empaquetamiento más eficaz.

El isómero cis es menos simétrico.

2.2. Isómeros ópticos.

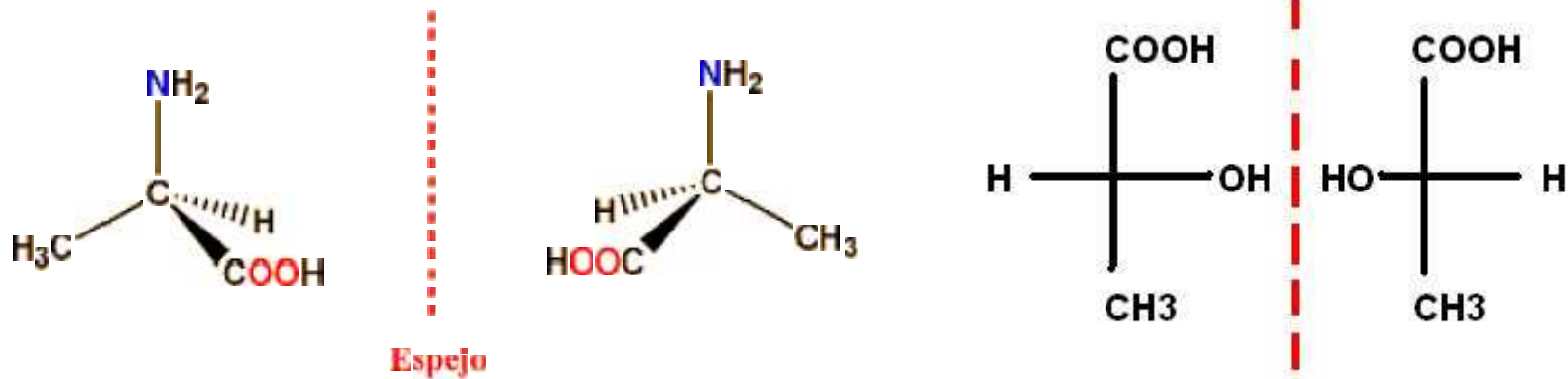
Existen sustancias que al ser atravesadas por luz polarizada plana, producen un giro del plano de vibración de la luz. Se dice que estas sustancias presentan actividad óptica. La causa de la actividad óptica radica en la asimetría molecular.

En química orgánica la principal causa de asimetría molecular es la presencia de algún carbono asimétrico (distintos tipos de sustituyentes). Se producen isómeros con las mismas características físicas y químicas, la única diferencia es que giran la luz. Estos isómeros se llaman **dextrógiros (+)** o **levógiros (-)**, y pueden dar origen a mezclas **racémicas**.

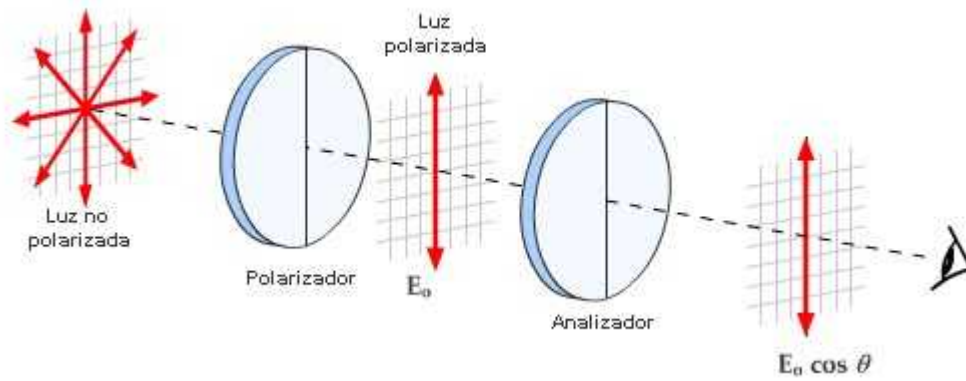
La **mezcla racémica** no presenta actividad óptica aparente, ya que contiene un 50% del isómero dextrógiro y un 50% de isómero levógiro.

Ejemplo: La alanina y el ácido láctico.

En una molécula con un solo átomo de carbono asimétrico son posibles dos configuraciones distintas, tal que una, cualquiera de ellas, es la imagen especular de la otra. Estas configuraciones son recíprocamente **enantiomeras**.



Nuestras manos son el ejemplo más cercano de **quiralidad**.

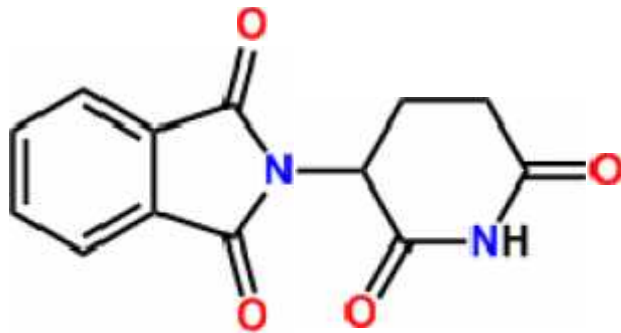


Muchas de las moléculas que constituyen los organismos vivos son quirales y en la mayoría de los casos existe preferencia por uno de los dos enantiómeros. Por ejemplo las proteínas de los seres vivos están constituidas de forma exclusiva por la forma enantiómera denominada *L* de sus aminoácidos, mientras que los hidratos de carbono están formadas por unidades de azúcar exclusivamente en la forma enantiómera denominada *D*, de la misma manera también se han observado formas enantiómeras en las moléculas de ADN y ARN.

Esta propiedad y las sutiles diferencias de estructura que involucra, se vuelve tan importante que, una molécula de quiralidad opuesta a la existente en la naturaleza no será reconocida por receptores ni atacada por enzimas, ya que la selectividad de ligandos y sustratos por sus sitios de unión o sitios catalíticos llega al nivel de identidad quiral.

Las drogas con acción farmacológica que poseen utilidad terapéutica de quiralidad específica, son tan diferenciadas que, el enantiómero posee muy poca o ninguna potencia. Entre ellos, se incluye un amplio rango de medicamentos (antiinflamatorios, antibióticos, para tratamientos cardiacos, cáncer, colesterol, etc.)

La **Talidomida** es una molécula relajante parecida al Diazepan, que fue sintetizada en la industria alemana en 1954, se usó como sedante para los primeros meses de embarazo.

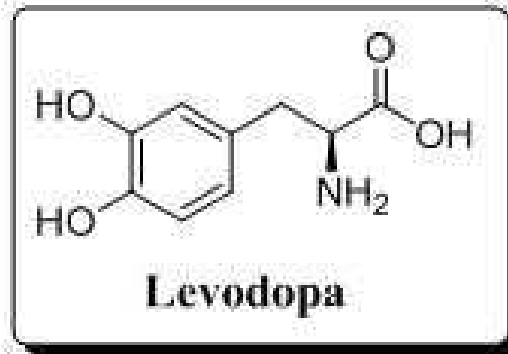


Enantiómero R → Activo.

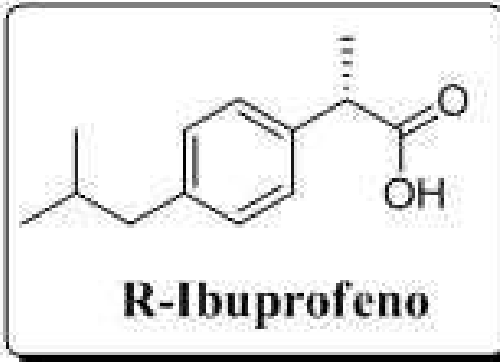
Enantiómero S → Provoca malformaciones.

Sin embargo, las pruebas realizadas con ella, no tuvieron todo el rigor que debieran o no eran todavía los tiempos de tamaño rigor. No se tuvo en cuenta su capacidad de causar daños a un embrión en crecimiento (**teratógeno**). El resultado fue la aparición de 10.000 casos de **focomelia** (ausencia o mal desarrollo de las extremidades). Casi todos los casos se dieron en Europa, porque en USA la FDA (Administración de alimentos y medicamentos) logra comprobar los daños.

La talidomida es una molécula quiral y de sus dos enantiómeros, uno es el teratógeno y el otro no. Hoy en día, este último tiene aplicación en casos de SIDA por su capacidad de inhibir la replicación del virus.



Es el medicamento aislado más eficaz contra el tratamiento de la *enfermedad de Parkinson*. Mientras que el enantiomero L (*el bueno*) es activo, el correspondiente enantiomero denominado *D* es biológicamente inactivo. La enfermedad de Parkinson se debe a un déficit de dopamina en ciertas áreas del cerebro. Además de temblores en las extremidades, los pacientes de Parkinson sufren rigidez muscular que dificulta la marcha, la escritura y el habla. Los síntomas de la enfermedad de Parkinson se alivian con la **levodopa** debido a que estimula el aumento de la producción de dopamina. La razón de que no se administre directamente dopamina es que es incapaz de pasar del torrente sanguíneo al cerebro, mientras que la levodopa, que es un precursor de la dopamina, si es capaz de hacerlo.



De las dos formas enantiómeras del Ibuprofeno, sólo la denominada *S* es la que tiene actividad farmacológica mientras que el enantiómero *R-Ibuprofeno* no tiene actividad antiinflamatoria en absoluto. El *R-Ibuprofeno* es el *enantiómero*, al que el cuerpo humano prefiere hacerle la “cirugía estética”. Mediante transformaciones enzimáticas el organismo es capaz de transformar hasta un 60% del enantiómero *R* en el enantiómero *S* activo. La típica dosis del Ibuprofeno son 400 mg, como **mezcla racémica**, 200 mg del enantiómero *S*, 200 mg del enantiómero *R*. Sin embargo tu cuerpo se encarga de convertir el *enantiómero R* en el activo por lo que en realidad la carga efectiva es de 320 mg de enantiómero *S-Ibuprofeno*.

2.3. Isómeros conformacionales.

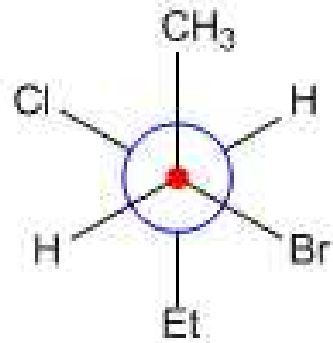
Dos o más conformaciones diferentes de una misma molécula reciben la denominación recíproca de **rotámeros** o **confórmeros**. Son producto las infinitas conformaciones posibles por libre rotación en torno al enlace simple. Pero no todas son igualmente probables, dependiendo de las interacciones entre los átomos de la misma molécula. Son **isómeros no separables**, con las mismas propiedades físico – químicas.

En el etano, que es uno de los casos más sencillos de considerar, las conformaciones más notables son la *alternada* y la *eclipsada*.

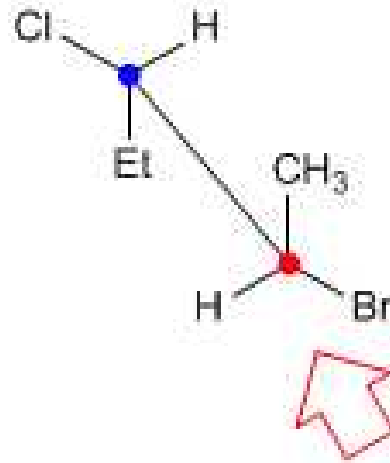
Conformaciones del etano, $\text{CH}_3 - \text{CH}_3$.

	Proyección de Newman	Proyección de caballete.	Proyección enlaces convencionales.
ALTERNADA			
ECLIPSADA			

¿CÓMO HACERLO?



Newman



Caballete

