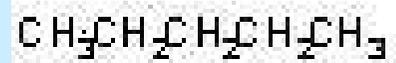


ISOMERÍA

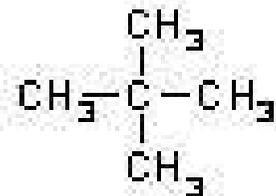
Tipos de Isómeros

- Isómeros de cadena: difieren en la cadena hidrocarbonada; el grupo funcional es el mismo pero los valores de las propiedades físicas son distintos.
- Isómeros funcionales: presentan igual fórmula molecular pero distinta función química.
- Isómeros de posición: el grupo funcional es el mismo, se encuentra en otro átomo de carbono de la cadena.
- Isómeros geométricos: resultan de la presencia de doble enlace C=C. Se denominan *cis* o *trans*.
- Isómeros ópticos: compuestos idénticos en la mayoría de las propiedades físicas y químicas, pero difieren en el comportamiento frente a la luz polarizada y también en los sistemas biológicos.

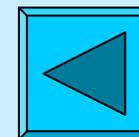
Isómeros de cadena



n-pentano



dimetilpropano



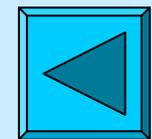
Isómeros funcionales



etanol



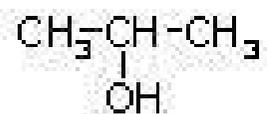
dimetiléter



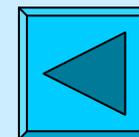
Isómeros de posición



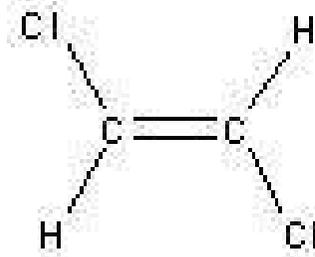
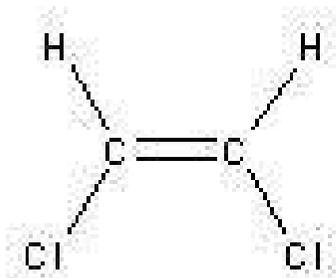
n-propanol



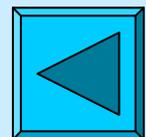
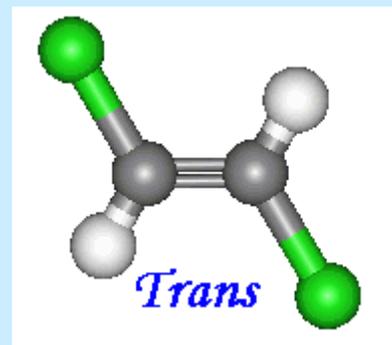
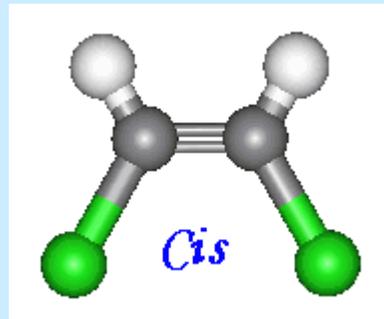
2-propanol



Isómeros geométricos



1,2-dicloroeteno



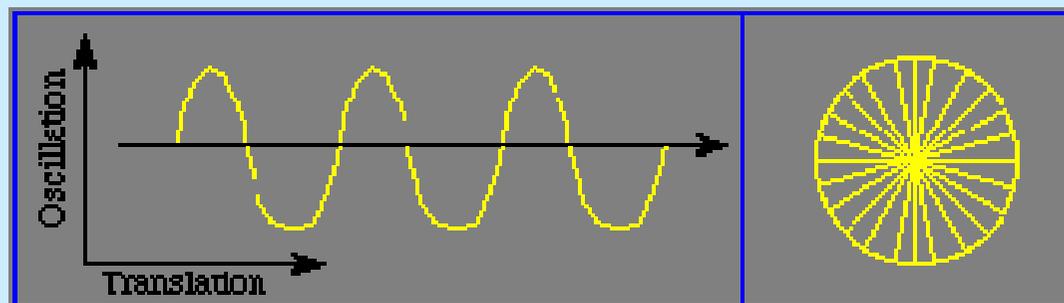
Luz polarizada

LUZ: energía electromagnética.

luz como onda (refracción, reflexión, difracción, etc.) luz como corpuscular (efecto fotoeléctrico)

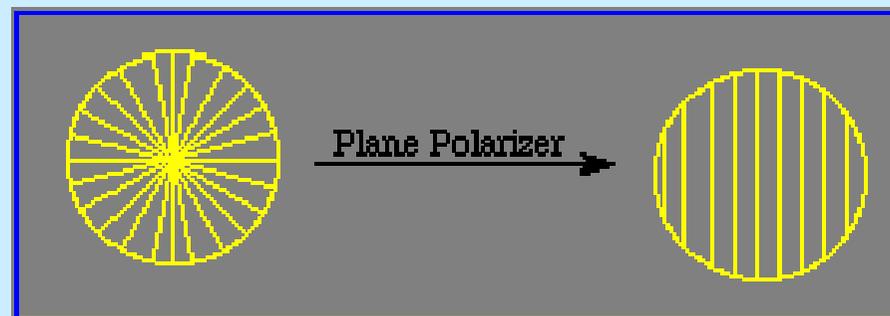
Fuente de luz monocromática, los rayos se propagan en forma rectilínea por medio de ondas transversales que vibran en infinitos planos.

El campo eléctrico para un fotón aislado es sinusoidal.



Campo eléctrico asociado a muchos fotones. El plano de oscilación de cada fotón tienen una orientación al azar.

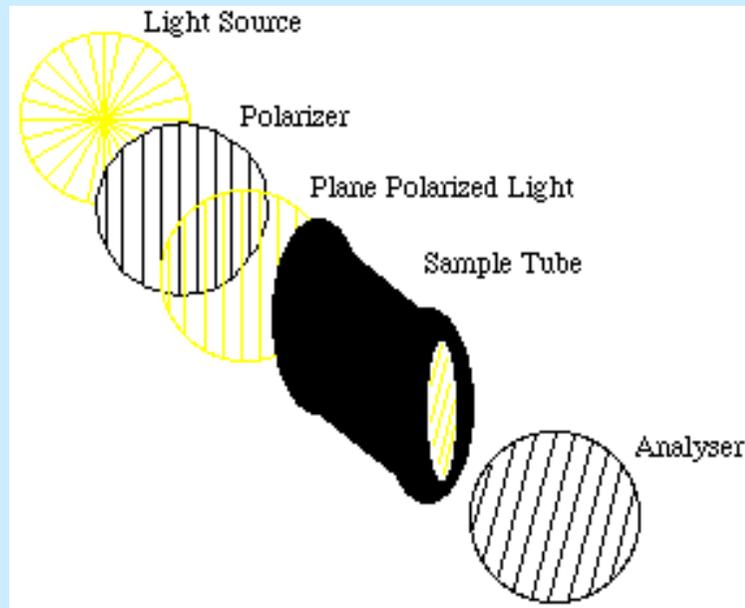
- Luz polarizada: aquella cuyas vibraciones ocurren en uno sólo de los planos posibles.
- La luz común se convierte en polarizada haciéndola pasar a través de un filtro, una lente construida con calcita (CaCO_3) o bien un cristal de tipo Polaroid que presentan esta propiedad.
- Estas lentes se conocen con el nombre de *Prisma de Nicol*.



Luz común

Luz polarizada

Polarímetro



Los filtros se pueden colocar:

- en forma perpendicular, en cuyo caso la luz no pasa, hay oscuridad
- en la misma dirección, con lo cual pasa el máximo de luz.

- Pongamos los polarizadores de forma tal que pase el máximo de luz.
- La luz, originada en la lámpara de sodio, incide sobre el primer prisma de Nicol, y es polarizada, luego atraviesa el tubo que contiene la muestra a analizar.
- Si la sustancia desvía el plano de vibración de la luz, se cambia la iluminación del campo, por lo que debemos rotar la segunda lente (prisma analizador) para que la transmisión lumínica sea otra vez máxima.
- Si eso ocurre, la sustancia es **ópticamente activa**.

- El número de grados que debemos rotar el analizador (a derecha o izquierda) se denomina *poder rotatorio* de la sustancia.
- Si debemos rotar hacia el analizador la derecha decimos que la sustancia es *dextrógira*;
- Si es necesario girarlo hacia la izquierda decimos que la sustancia es *levógira*.
- El poder rotario depende de:
 - la longitud de onda de la radiación
 - la concentración del líquido analizado - si es una solución
 - la temperatura
 - la longitud del tubo que contiene la muestra

•Es más útil trabajar con el *poder rotatorio específico o rotación específica*:

número de grados que se desvía el plano de vibración de luz polarizada si se utiliza una solución de 1 g/cm³ de concentración y 1 dm de largo.

•Esta propiedad se tabula a 20 °C y para una longitud de onda conocida como la línea D de sodio (que se corresponde con 589.3 nm).

$$[\alpha] = \frac{\alpha}{d * l}$$

d: concentración (gr/cm³) para soluciones, o densidad para los líquidos puros

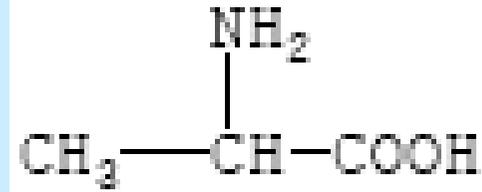
l: distancia en dm.

<http://scholar.hw.ac.uk/site/chemistry/activity5.asp?outline=>

Muestra animación del efecto de compuestos ópticamente activos en el plano de la luz polarizada

Ejemplo:

Alanina

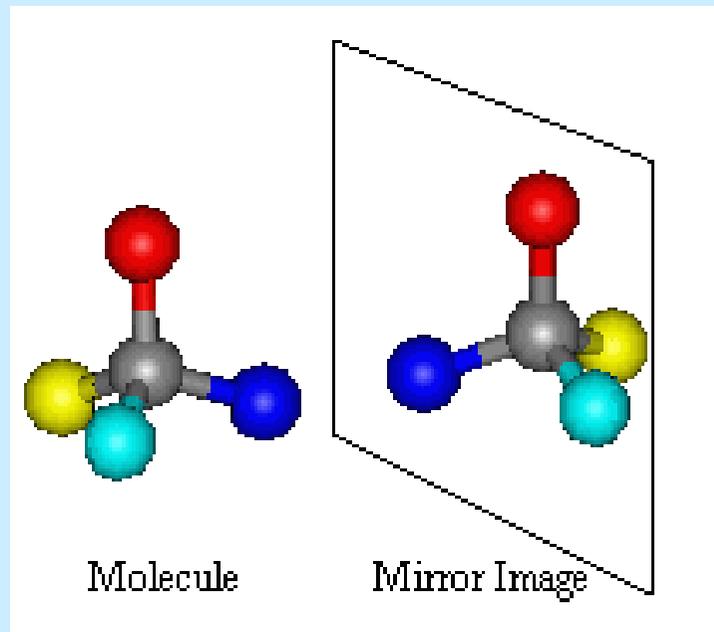


Rotación específica (S)-alanine, $[\alpha]_D^{20} = +14.5^\circ$.

- $[\alpha]$ representa la rotación específica
- D por la línea D del sodio
- 20 indica la temperatura en °C
- La dirección de rotación del plano de la luz polarizada se indica con los signos "+" o "-".
- (S)-(+)-alanine. The enantiomer of (S)-(+)-alanine is (R)-(-)-alanine.

Rotación específica de (R)-(-)-alanine es -14.5° .

ISOMERÍA ÓPTICA



Carbono quiral: aquel átomo de carbono enlazado a cuatro sustituyentes diferentes.

Molécula con 1 átomo quiral \Rightarrow dos formas estereoisómeras

Molécula con 2 átomos quirales, no siempre es quiral

ESTEREOISÓMEROS

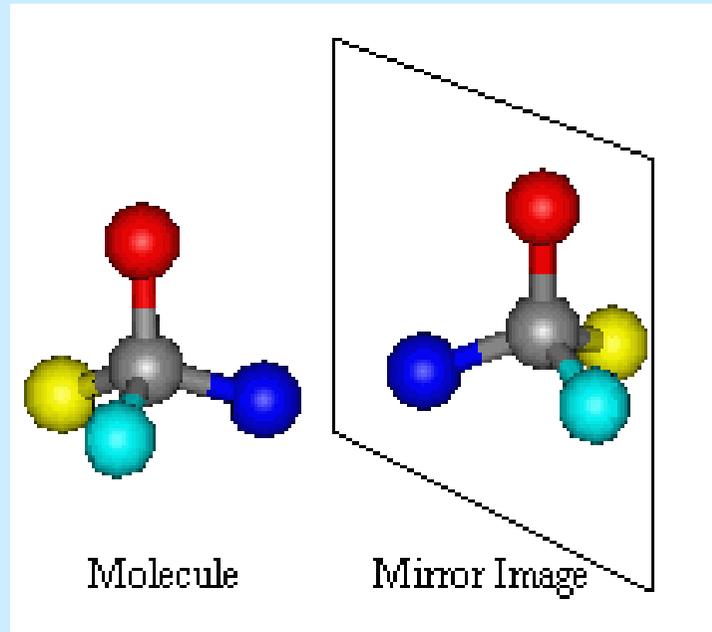
```
graph TD; A[ESTEREOISÓMEROS] --> B[ENANTIÓMEROS]; A --> C[DIASTÉRÓMEROS];
```

ENANTIÓMEROS

Imágenes especulares
no superponibles

DIASTÉRÓMEROS

Estereoisómeros que no
son imágenes especulares



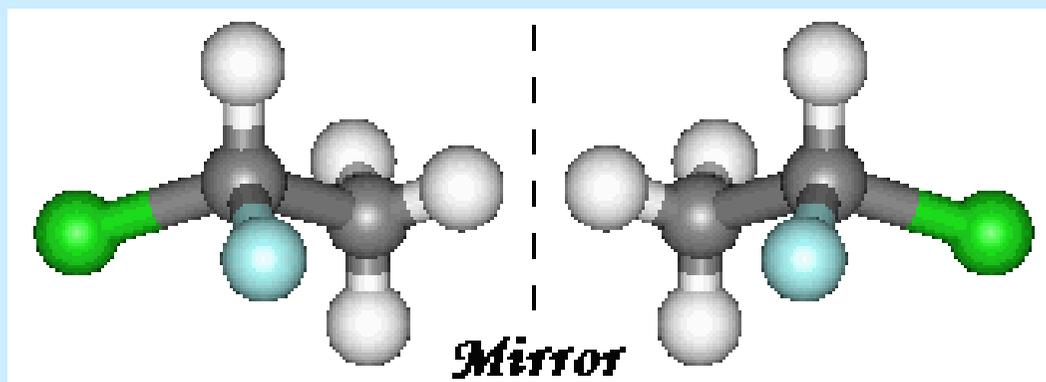
ISOMEROS OPTICOS no se superponen con su imagen especular: enantiómeros.

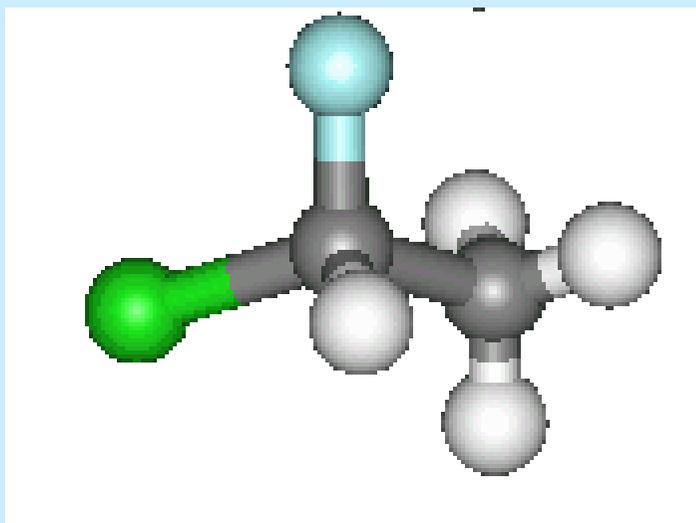
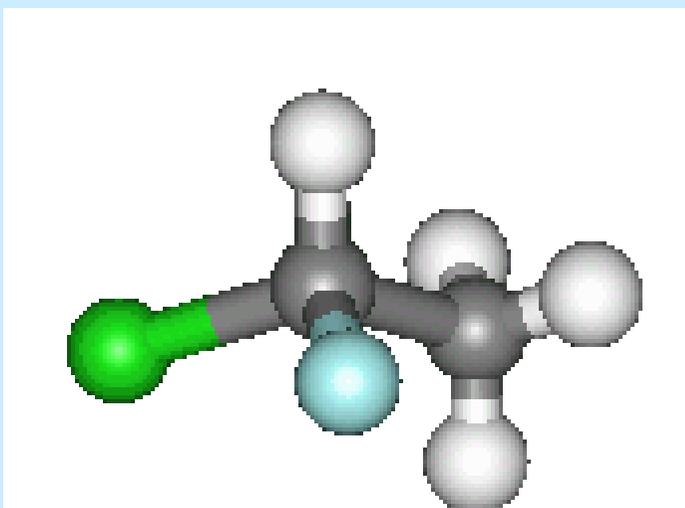
Enantiómeros no se pueden interconvertir sin romper enlaces. Tienen propiedades físicas idénticas, excepto la actividad óptica.

Si un enantiómero rota el plano de la luz polarizada en sentido horario, el otro lo hace en sentido antihorario.

Ejemplo:

- 1,1-clorofluoroetano (un CFC). El carbono 1 está enlazado a H, Cl, F y CH₃, es quiral.
- Existe en dos formas enantioméricas, que no son superponibles

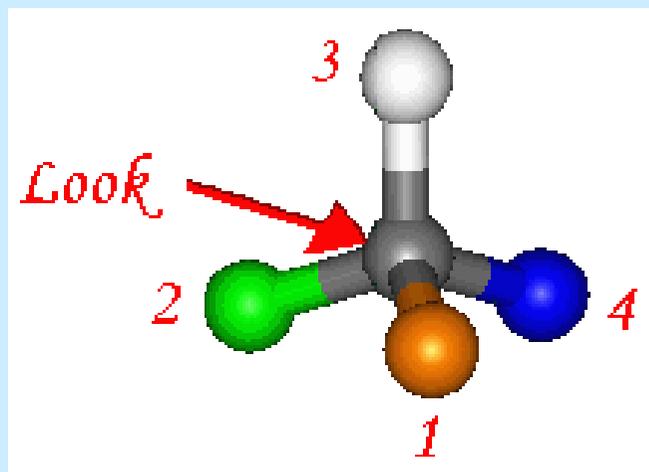




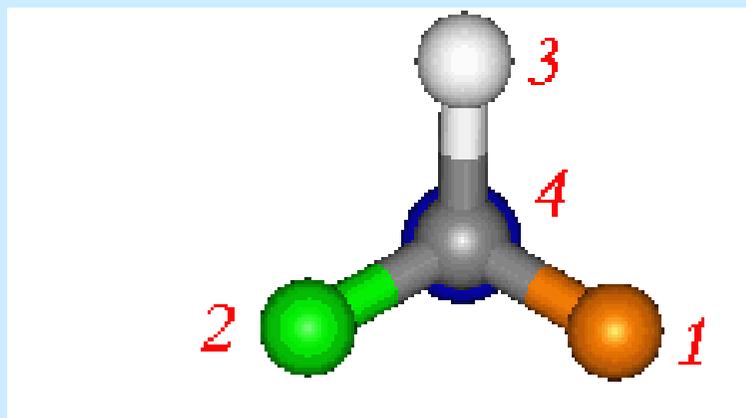
Si alineamos los átomos de cloro, los de flúor quedan con orientaciones diferentes, y viceversa.

Nomenclatura de los isómeros ópticos

- Configuración absoluta 'R' o 'S'
- Asignar prioridades a los sustituyentes, según peso molecular del átomo unido al C quiral: el de mayor peso tendrá prioridad 1, luego 2, etc.

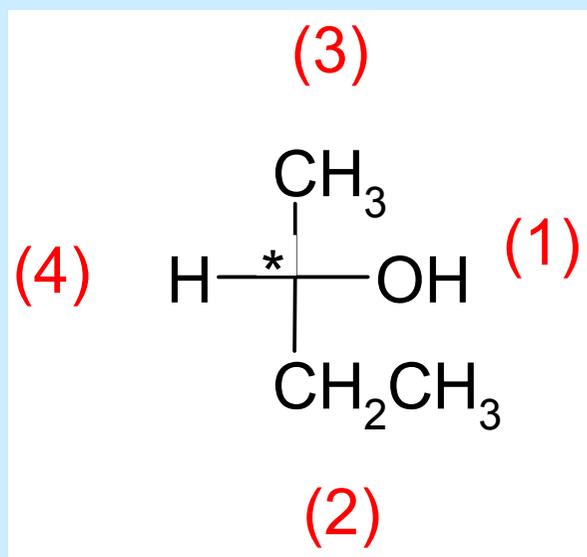
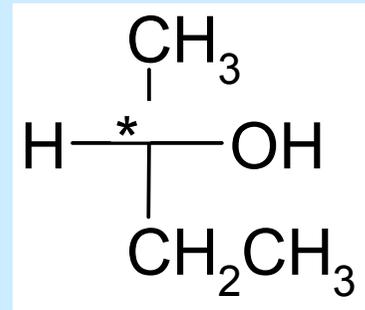


- Girar la molécula poniendo el grupo de menor prioridad (generalmente H) hacia atrás.
- Seguir el orden de prioridad de los grupos (1-2-3)
- Si es en sentido horario, la molécula es el isómero R
- Si es en sentido antihorario, la molécula es el isómero S

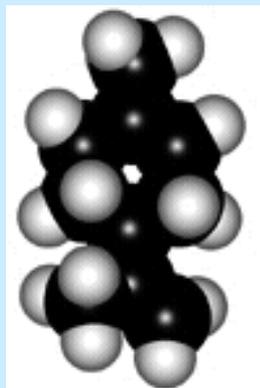
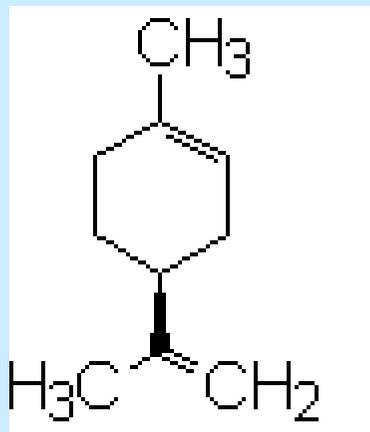


Isómero R

Ejemplo: 2-butanol

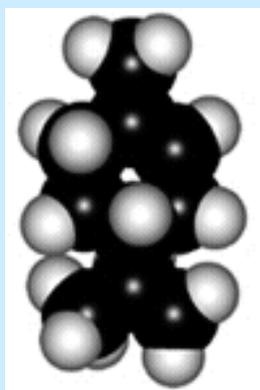
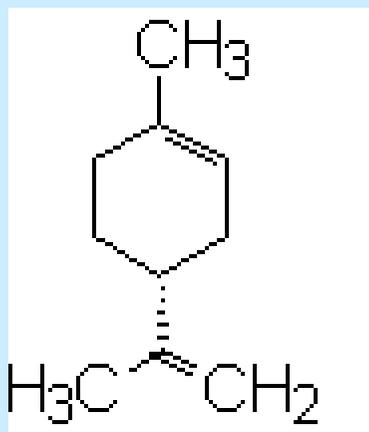


Ejemplo: Limoneno



S-(-)-limoneno (p.eb. 176°C)

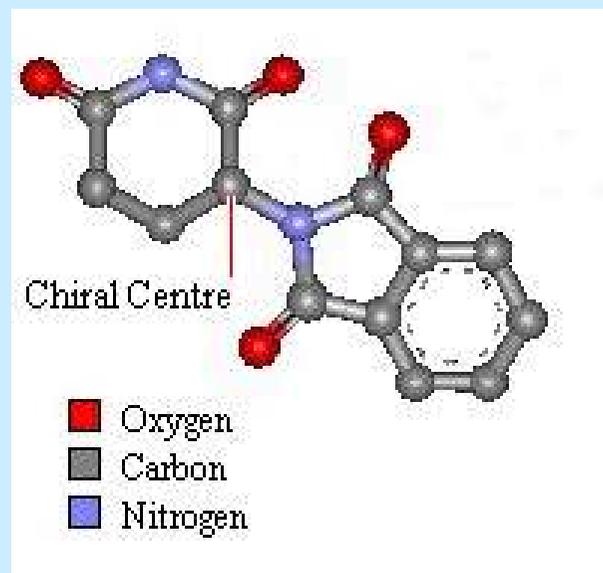
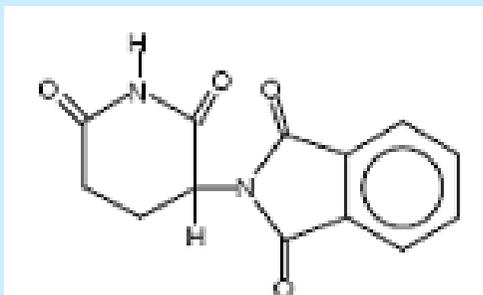
El limoneno se presenta en tres formas, dextrógira, levógira y racémica. El limoneno levógiro (-) se extrae de la cáscara de la naranja y le confiere su olor característico



R-(+)-limoneno (p.eb.176°C)

El limoneno dextrógiro (+) abunda en la naturaleza. Es un líquido aceitoso que puede extraerse fácilmente de la cáscara del limón y es responsable de su olor.

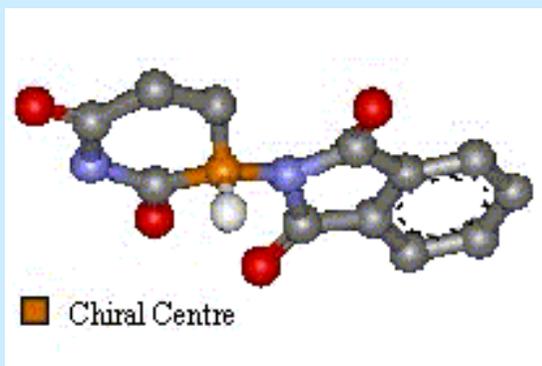
Ejemplo: Talidomida



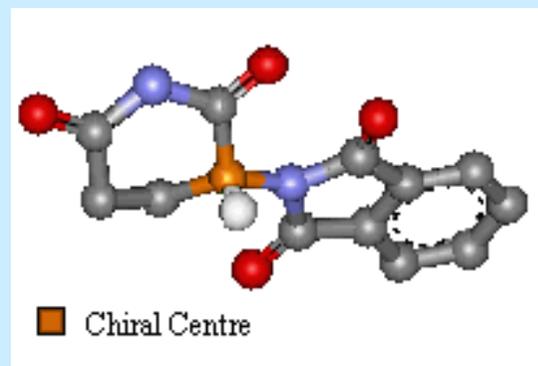
(molécula sin hidrógenos)

- Tiene un átomo de carbono quiral
- Existen dos enantiómeros
- Dos de los grupos unidos al C quiral son parte del mismo anillo, pero se consideran grupos diferentes.

- Diferencia entre isómero S y R: posición de los grupos funcionales.



Isómero S

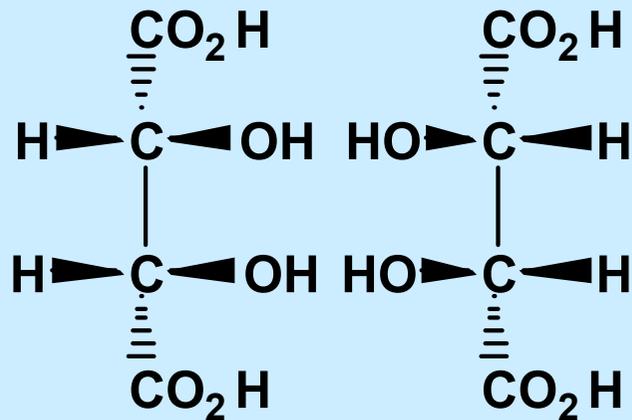


Isómero R

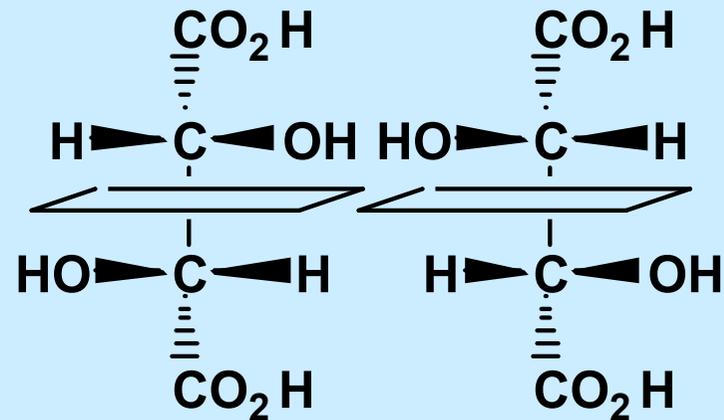
- El enantiómero S es un sedante efectivo, pero el enantiómero R es teratogénico.
- Aunque se sintetice una muestra estereoselectiva de talidomida (un isómero óptico), el pH en el cuerpo puede causar racemización: se forman los dos enantiómeros en cantidades similares en la sangre.

Dos o más Centros Quirales

- Acido tartárico (ácido 2,3-dihidroxitbutano dioico)
- $2^n = 4$ isómeros esperados, pero existen sólo 3



A pair of enantiomers



A meso compound
(plane of symmetry)

- **Compuesto meso:** compuesto aquiral, pues tiene dos o más centros quirales, pero también un plano de simetría