

# QUÍMICA ORGÀNICA 2N BATX

## Isomeria

Alba López Valenzuela i Rodrigo Alcaraz de la Osa. Traducció: Òscar Colomar (🐦@ocolomar)



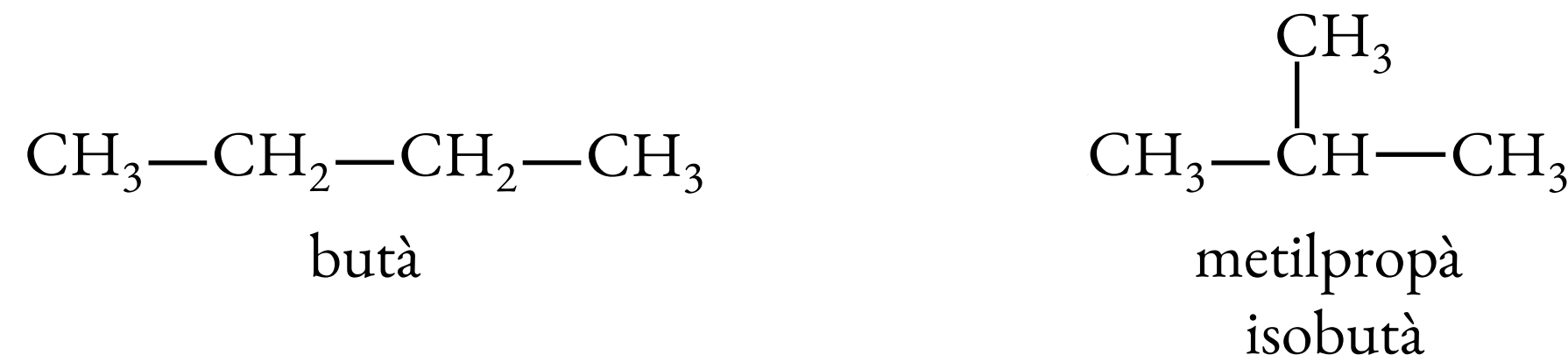
Dos compostos són **ISÒMERS** entre si si tenen el mateix número i tipus d'àtoms, és a dir, si tenen la **mateixa fórmula molecular**. Dos compostos isòmers tenen el **mateix nombre d'insaturacions**.

### Isomeria constitucional

Es deu a **diferències** en l'**estructura** dels **compostos**, és a dir, canvia com estan units els àtoms (tenen diferent connectivitat). Dins d'aquest tipus, hi ha tres subtipus d'isomeria:

#### Isomeria de cadena

Es presenta en compostos que difereixen en l'**ESQUELET** de la **CADENA CARBONADA**:



#### Isomeria de posició

Es presenta en compostos que difereixen en la **POSICIÓ** del seu **GRUP FUNCIONAL**:



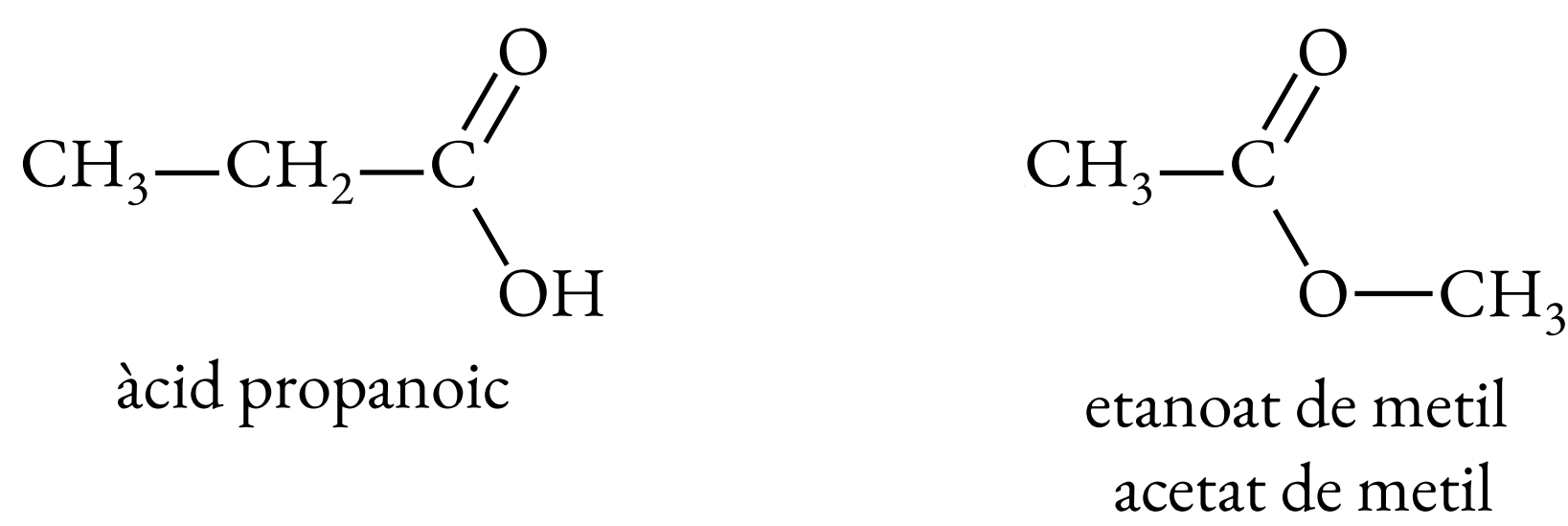
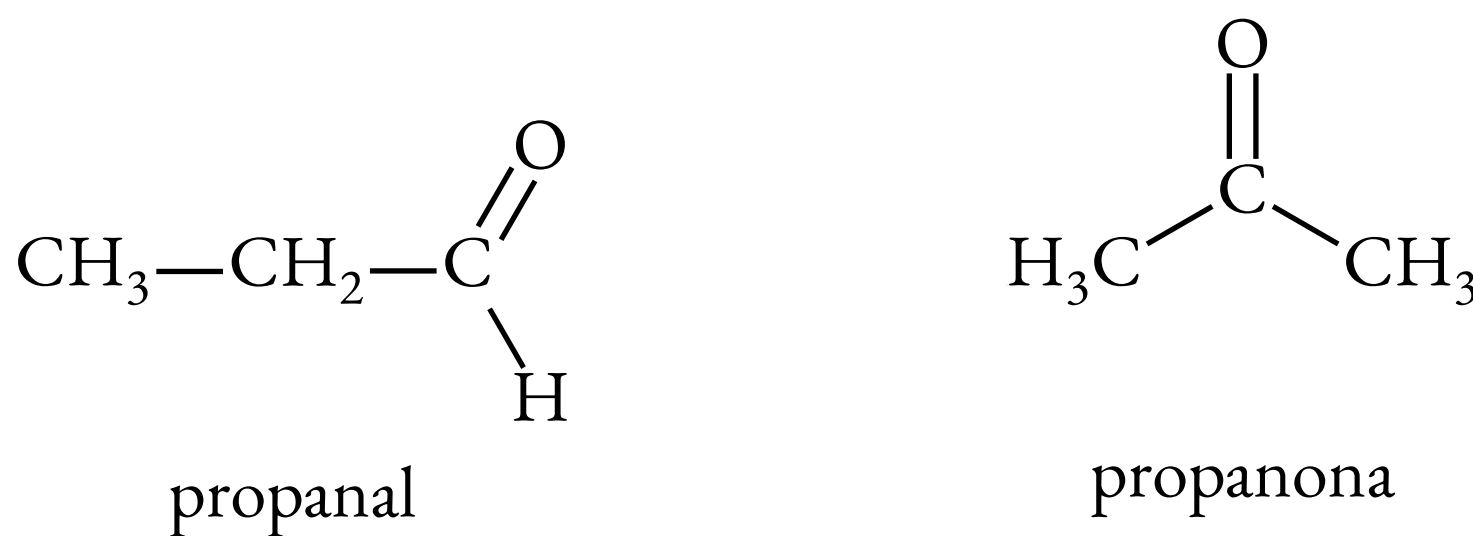
#### Isomeria de funció

Es presenta en compostos que tenen **GRUPS FUNCIONALS DIFERENTS**.

Solen ser isòmers de funció entre si:

- alcohols-èters,
- aldehids-cetones,
- i àcids carboxílics-èsters,

encara que existeixen moltes altres possibilitats.



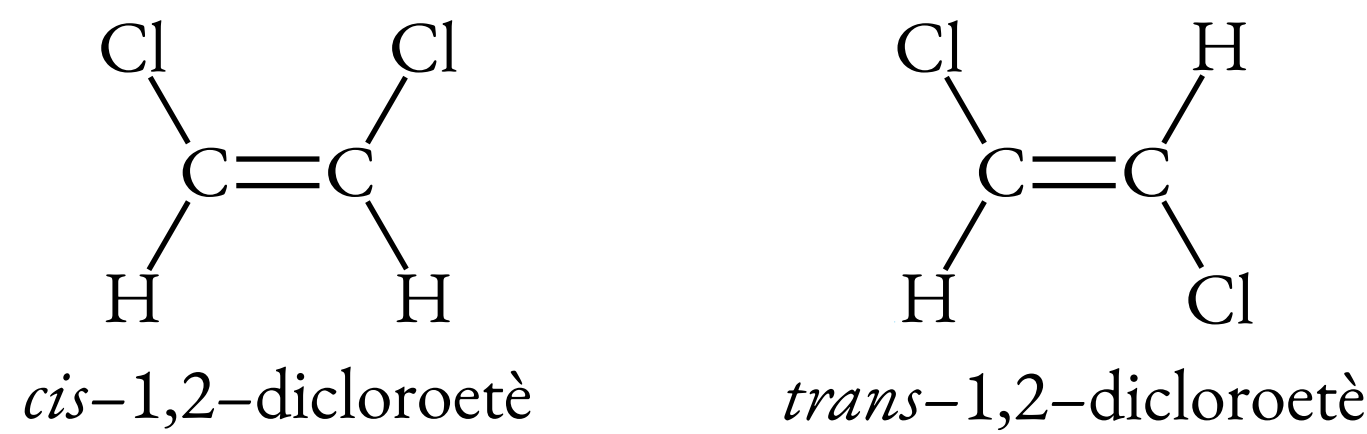
### Estereoisomeria

L'estructura de les substàncies és la mateixa (igual connectivitat entre àtoms) però es **diferencien** en la seva **orientació espacial**.

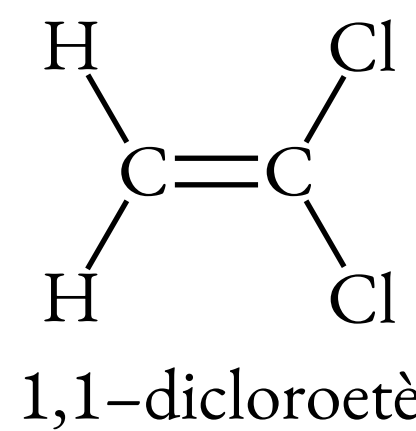
#### Isomeria geomètrica (*cis-trans*)

La isomeria *cis-trans* es presenta en alguns alquens, a causa de la incapacitat de rotació del doble enllaç. Perquè un doble enllaç present isomeria *cis-trans*, no pot haver-hi sobre qualsevol dels dos carbonis del doble enllaç dos substituents iguals. Dos compostos amb aquesta mena d'isomeria geomètrica són **DIASSTEREISÒMERS**, sent les seves propietats físiques diferents.

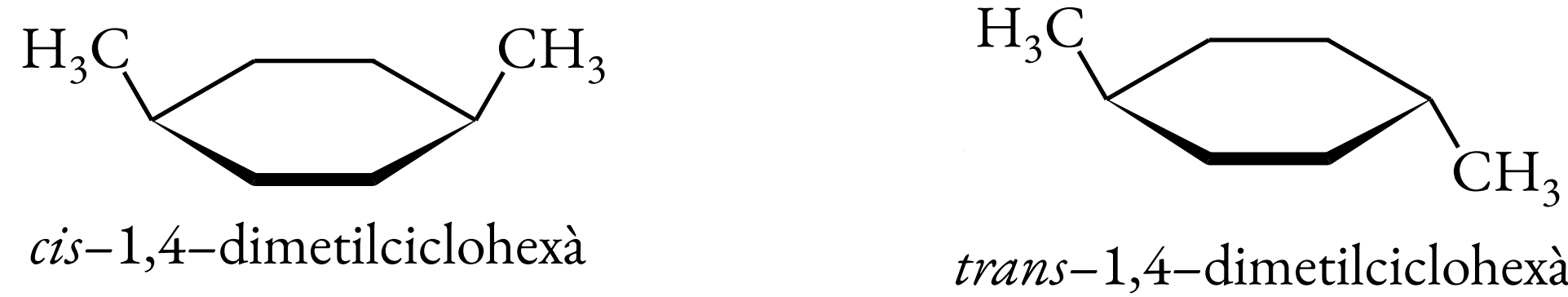
Els isòmers *cis* tenen tots dos substituents del doble enllaç cap a un costat, els *trans* cap a costats oposats:



L'1,1-dicloroetè no pot presentar isomeria *cis-trans*:



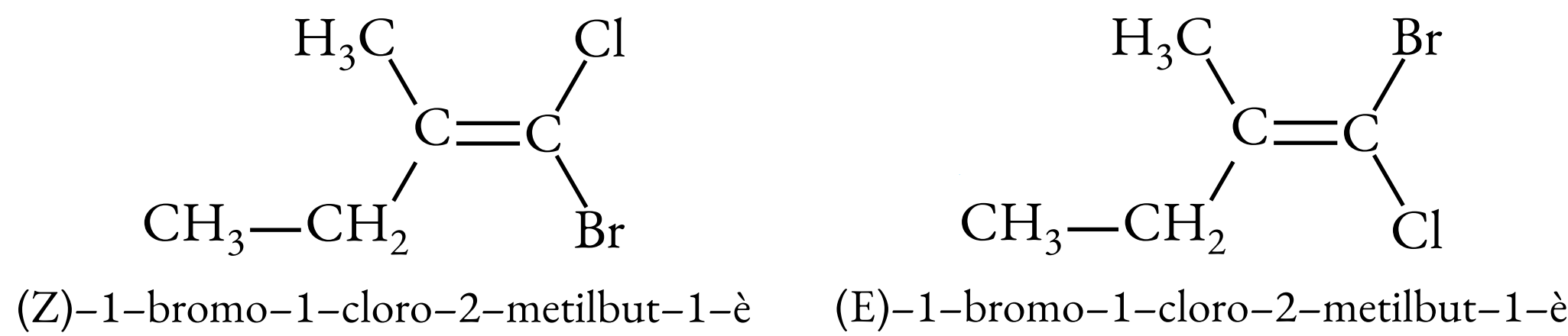
Aquest tipus d'isomeria es dona també en compostos amb un pla de simetria, a causa de la impossibilitat de rotació:



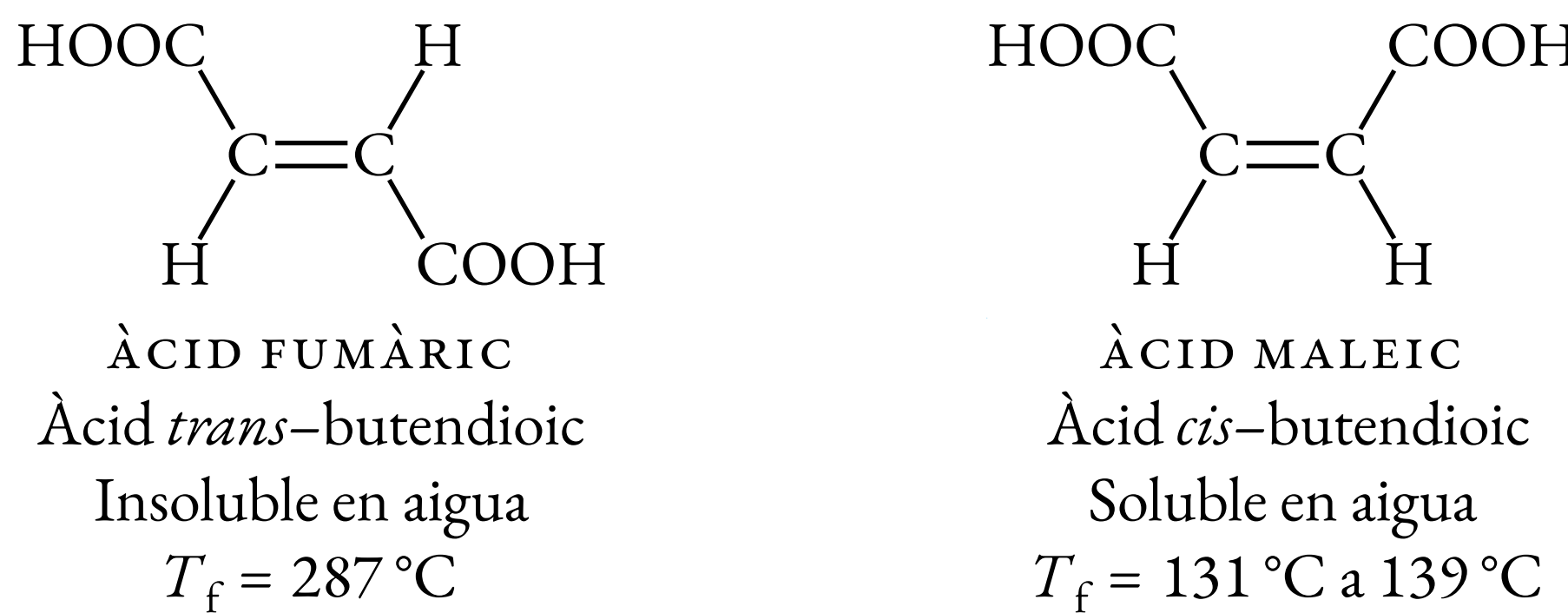
**Notació E-Z** Quan existeixen diversos substituents diferents, la nomenclatura *cis-trans* en alguns pot resultar ambigua. En aquests casos s'adopta la nomenclatura E-Z. En alemany:

- E d'*entgegen* (separats).
- Z de *zusammen* (junts).

A cada carboni del doble enllaç, el substituent de major nombre atòmic té major jerarquia. En cas d'empat, se segueix el mateix criteri amb els àtoms units a ells, fins a desempatar. L'isòmer Z serà el que tingui els dos substituents de major jerarquia del mateix costat del doble enllaç i l'isòmer E serà el que els tingui a diferent costat:



Un exemple del diferents que poden arribar a ser dos isòmers *cis-trans* ho tenim amb els àcids fumàric i maleic:

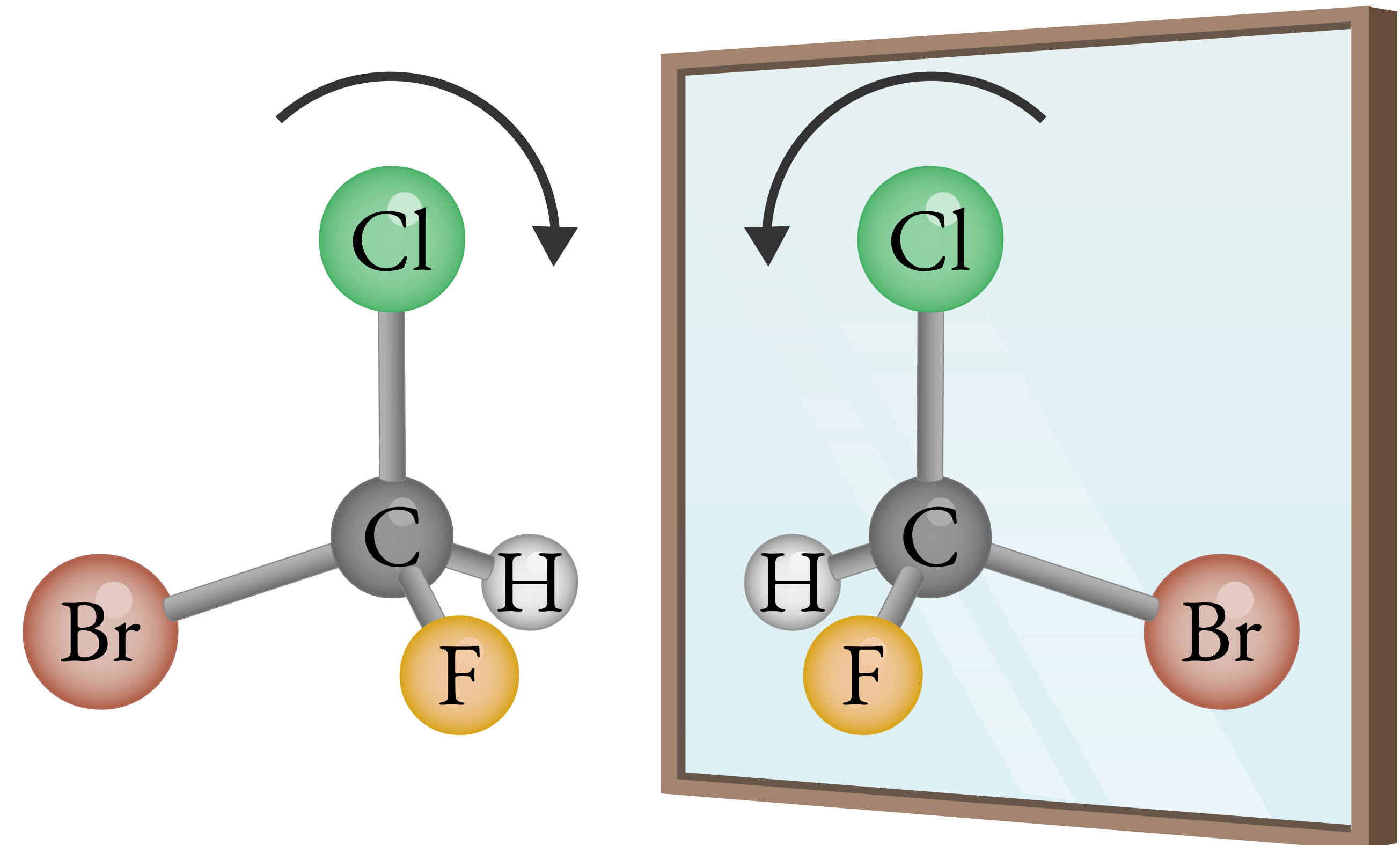


Sent el primer fonamental en diverses rutes del metabolisme cel·lular, destacant la seva participació en el cicle de Krebs; i el segon tòxic. Les seves propietats físiques són molt diferents.

### Estereoisomeria (cont.)

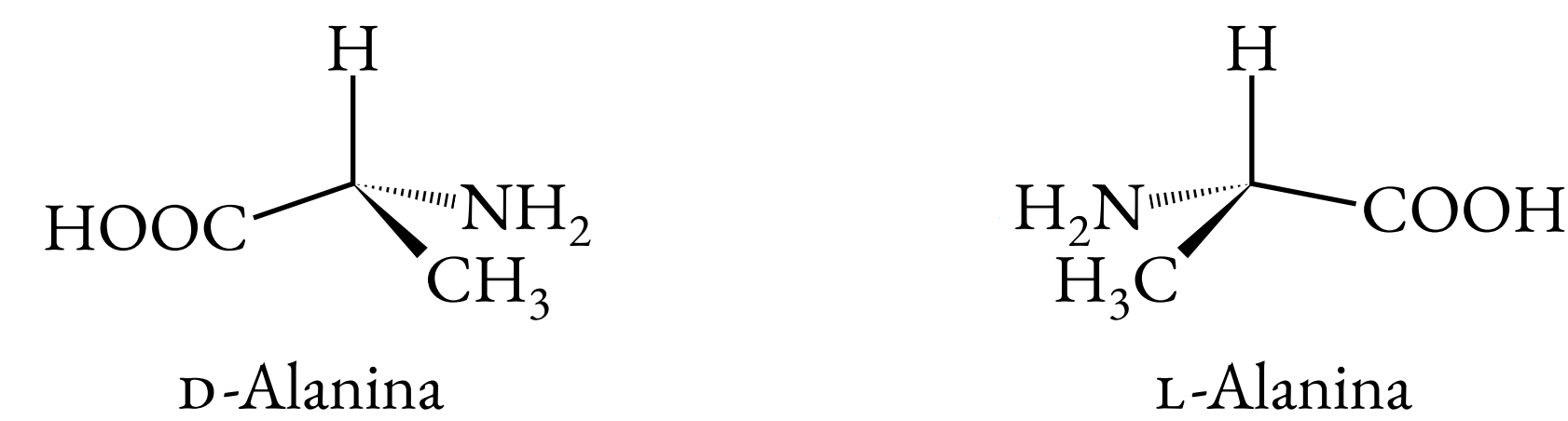
#### Isomeria òptica

La isomeria òptica es presenta quan un compost no és superponible amb la seva imatge especular, i en aquest cas es diu que són **ENANTIÒMERS**. Perquè això ocorri, la molècula ha de posseir almenys un carboni **QUIRAL**. Un carboni quiral és un carboni que té 4 substituents diferents:



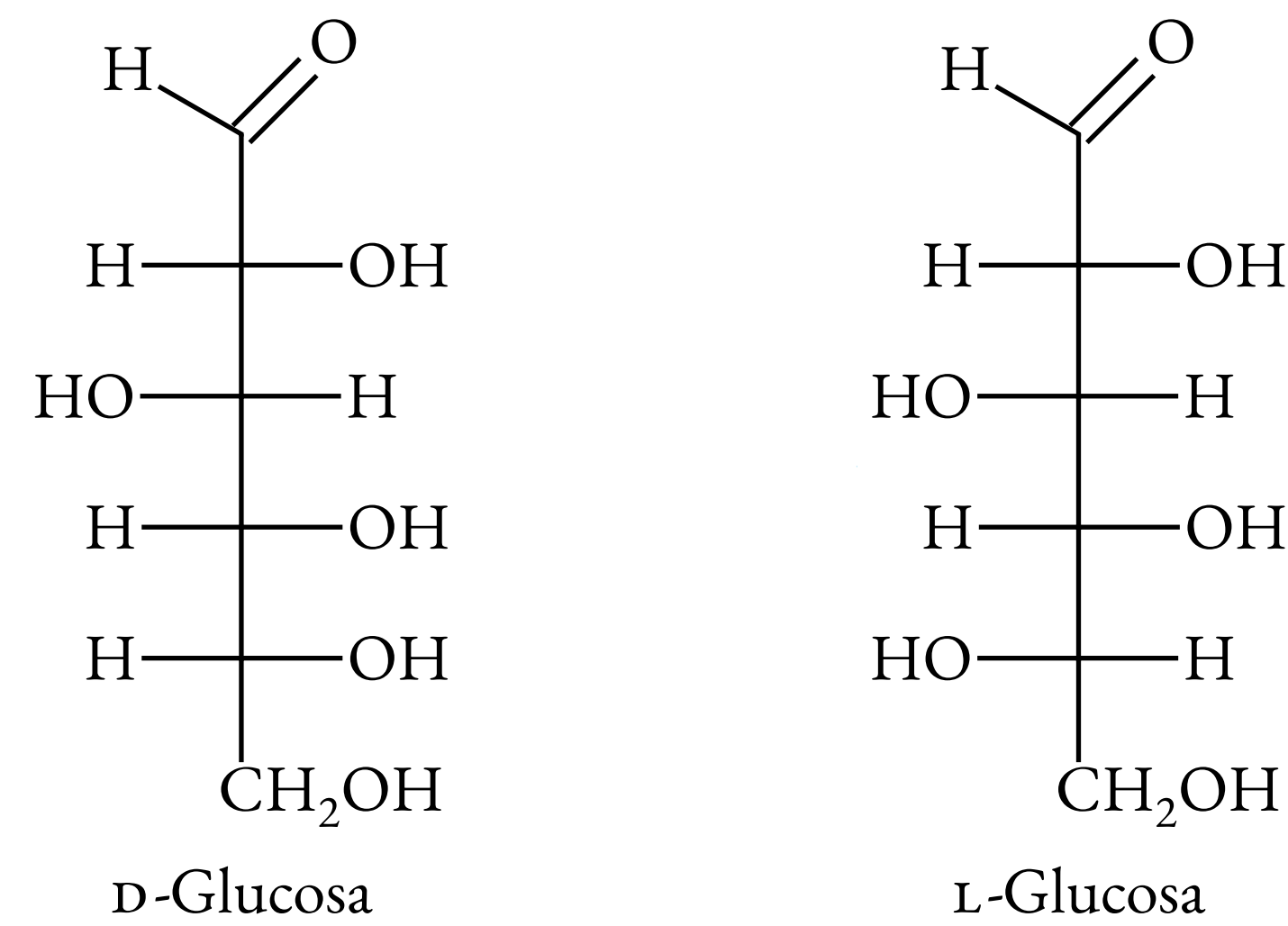
L'àtom de carboni negre és un centre quiral perquè té quatre substituents diferents, un àtom de clor (Cl), un àtom d'hidrogen (H), un àtom de fluor (F) i un àtom de brom (Br). Les dues estructures són imatges especulars l'una de l'altra que no poden superposar-se. Adaptada de <https://www.coursehero.com/sg/general-chemistry/chirality/>.

Aquest és el tipus de estereoisomeria que presenten molècules essencials per a la vida, com els aminoàcids i els monosacàrids. Els enantiòmers tenen propietats físiques idèntiques, diferenciant-se únicament en el seu comportament enfront de la llum polaritzada, perquè la desvien de manera diferent (mesurable amb un polarímetre). Si el pla de la llum polaritzada es desvia a la dreta són substàncies *dextrògires* i si es desvia a l'esquerra, *levògires*:

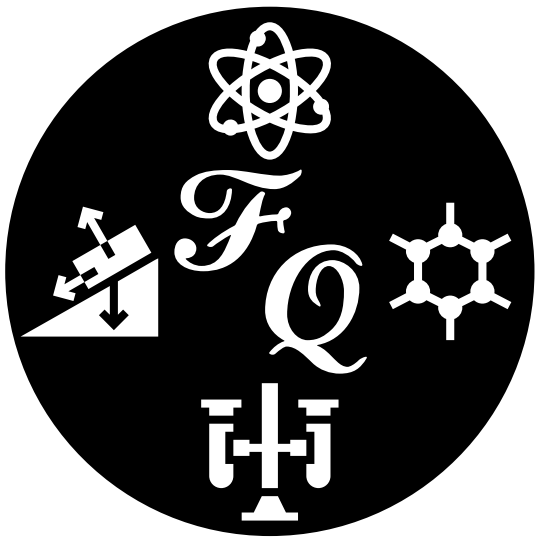


Pel que fa a la **REACTIVITAT**, poden reaccionar de diferent manera amb altres compostos quirals, com molts fàrmacs quirals amb els enzims (especialment sonada va ser l'anomenada **catàstrofe de la talidomida**).

**Projeccions de Fischer** Amb la finalitat de facilitar la representació en el pla, s'utilitzen les **PROJECCIONS DE FISCHER**, ideades pel químic alemany Hermann Emil Fischer al 1891, per a representar la disposició espacial de molècules en les quals un o més àtoms de carboni són quirals:







# QUÍMICA ORGÀNICA 2N BATX

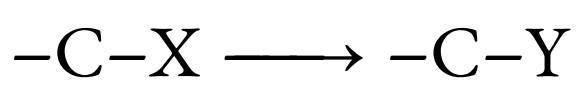
## Reactivitat

Alba López Valenzuela i Rodrigo Alcaraz de la Osa. Traducció: Òscar Colomar (🐦@ocolomar)



### Reaccions de substitució

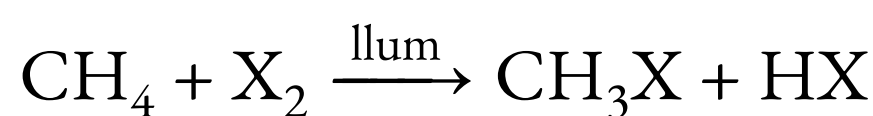
En aquest tipus de reaccions un àtom o grup d'àtoms d'una molècula és substituït per un altre àtom o grup d'àtoms d'una altra molècula:



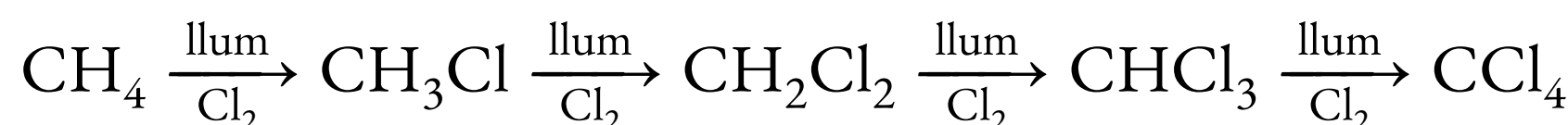
#### Halogenació d'alcanes

Els alcanes experimenten reaccions de substitució RADICALARIES. Així, es pot aconseguir la substitució d'un enllaç  $-C-H$  per un enllaç  $-C-X$  mitjançant radiació lluminosa.

S'anomena SUBSTITUCIÓ FOTOQUÍMICA i és una reacció en la qual la llum trenca la molècula d'halogen  $X_2$  ( $F_2$ ,  $Cl_2$ ,  $Br_2$  o  $I_2$ ) donant una reacció en cadena amb fórmula general:

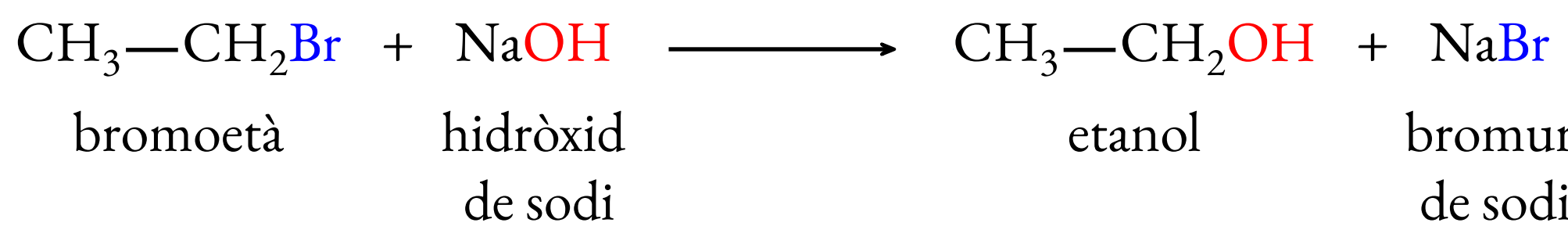


La reacció pot continuar precisant a cada etapa llum o calor. A cada etapa es forma  $HX$  com a producte. La següent reacció està particularitzada per a ( $X = Cl$ ). A cada etapa, a més del producte de substitució, es forma  $HCl$ :  $HCl$ :



#### Transformació d'un derivat halogenat en un alcohol

La HIDRÒLISI d'un haloalcà es duu a terme amb  $NaOH$  que dona la substitució de l'halogen pel grup  $-OH$ , donant l'alcohol:

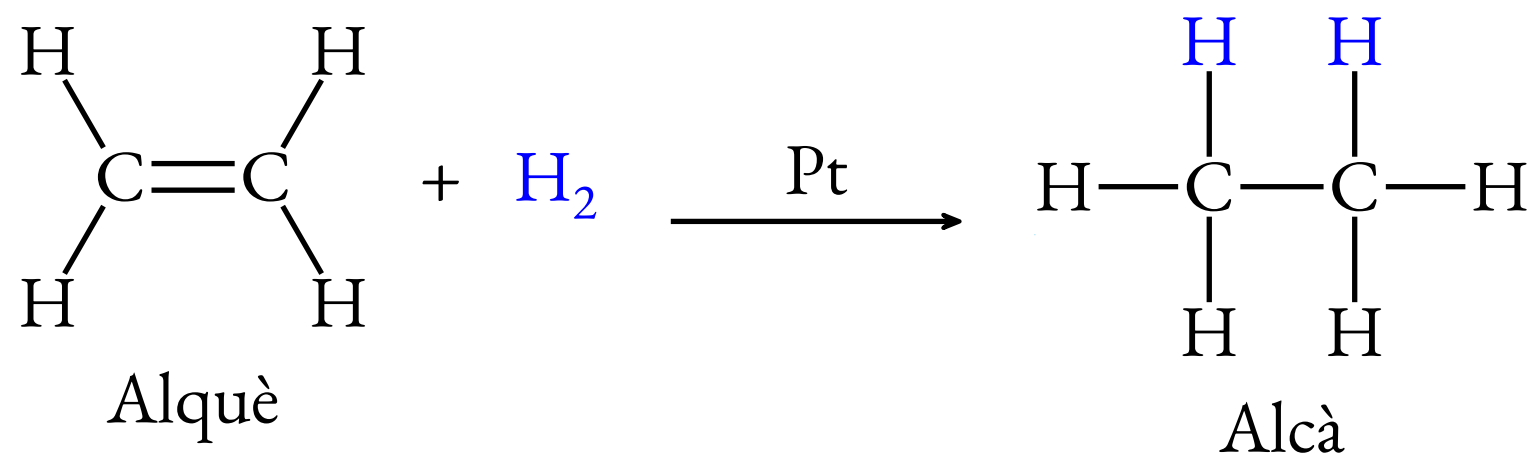


### Reaccions de addició

Una molècula incorpora a la seva estructura una altra molècula. Ocorren amb substrats amb dobles o triples enllaços originant un producte amb un major grau de saturació.

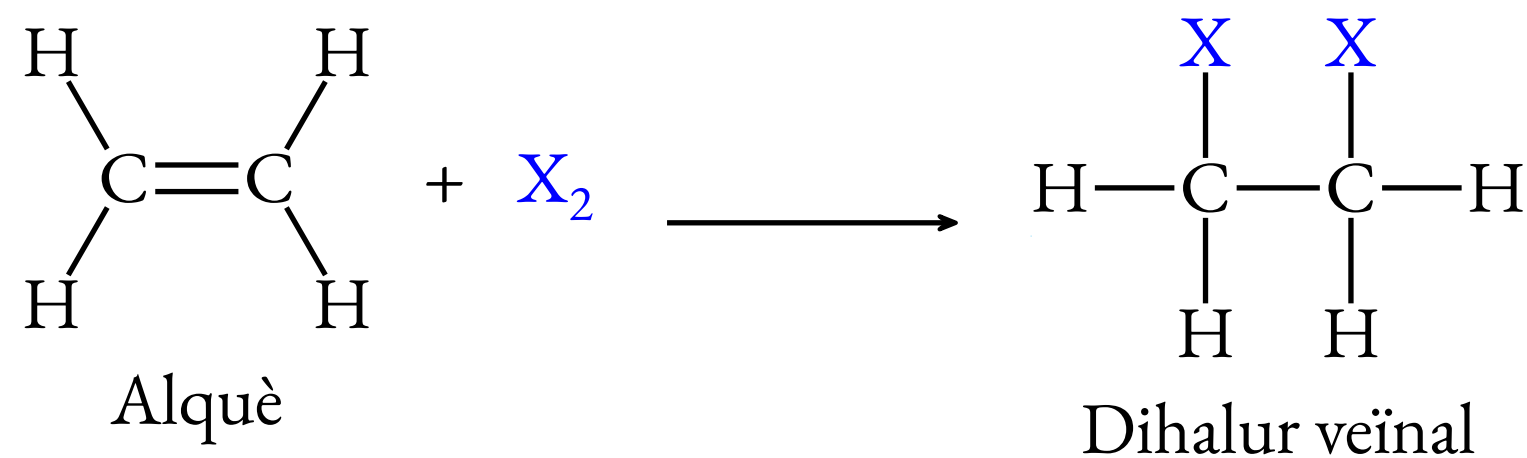
#### Hidrogenació catalítica d'alquens

Es realitza amb hidrogen molecular en presència d'un catalitzador, normalment platí. És un procés exotèrmic. La reacció transcorre de manera que cada àtom d'hidrogen de la molècula  $H_2$  s'afegeix a un dels dos carbonis que formen l'enllaç múltiple en el reactiu, saturant la molècula:



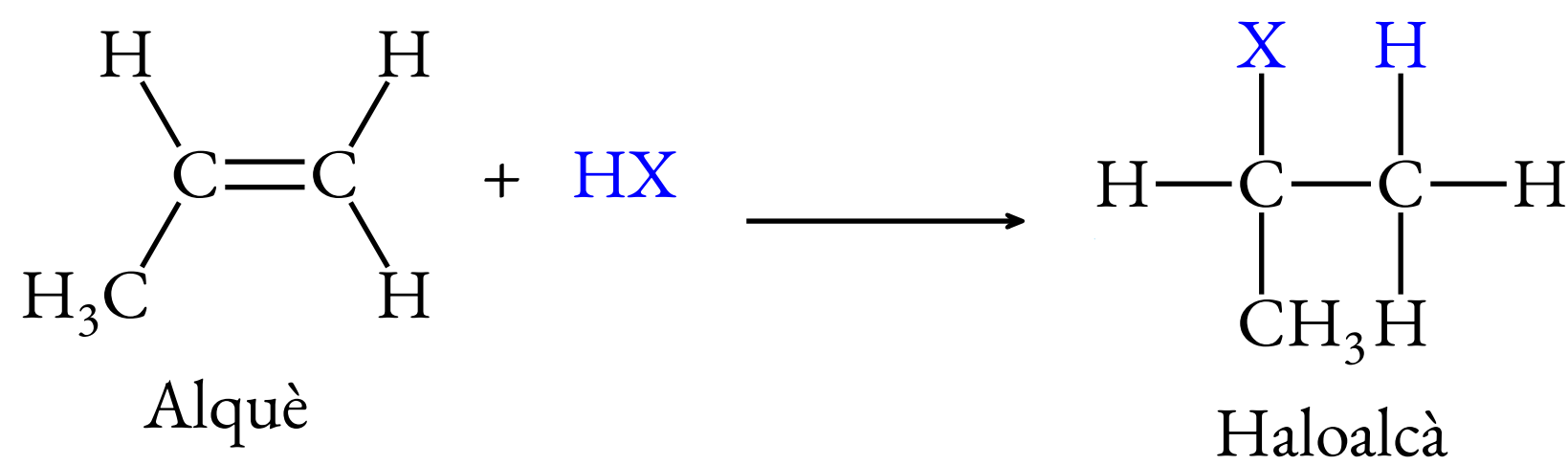
#### Halogenació d'alquens

De manera anàloga a la hidrogenació, l'halogen  $X_2$  afegeix un àtom d'halogen a cada carboni que forma l'enllaç múltiple formant un dihalogen veïnal:



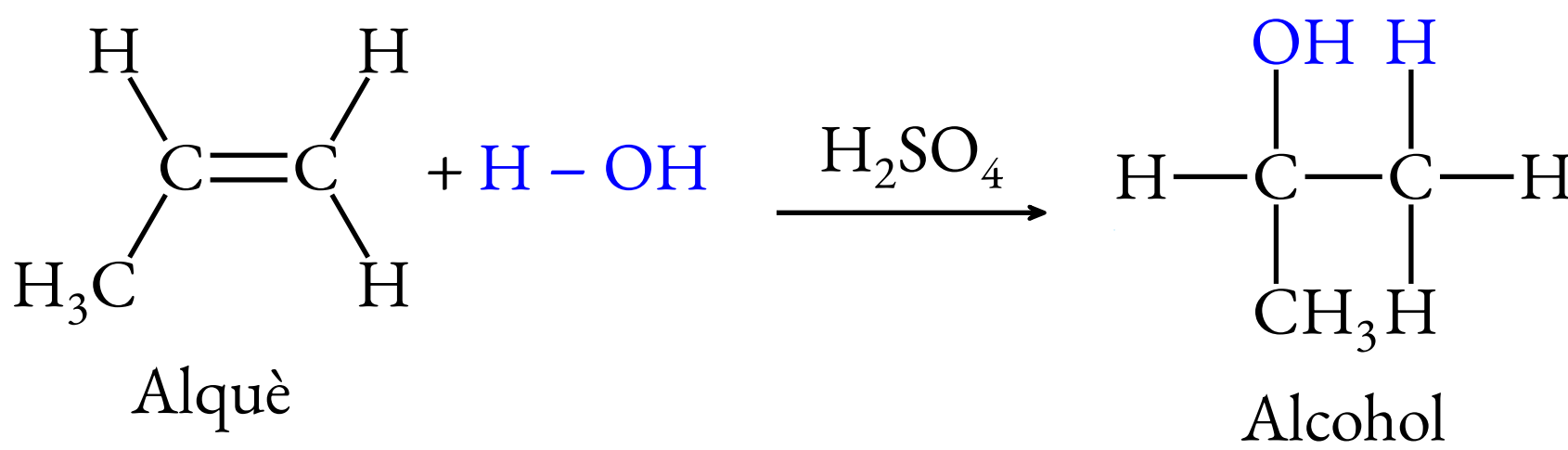
### Reaccions d'addició (cont.)

#### Hidrohalogenació d'alquens



#### Hidratació d'alquens

La reacció succeeix en el tractament de l'alquè amb aigua i un catalitzador àcid fort, com el  $H_2SO_4$ , per un mecanisme similar al de l'addició de  $HX$ . L'aigua  $H_2O$  també s'afegeix a l'enllaç múltiple:

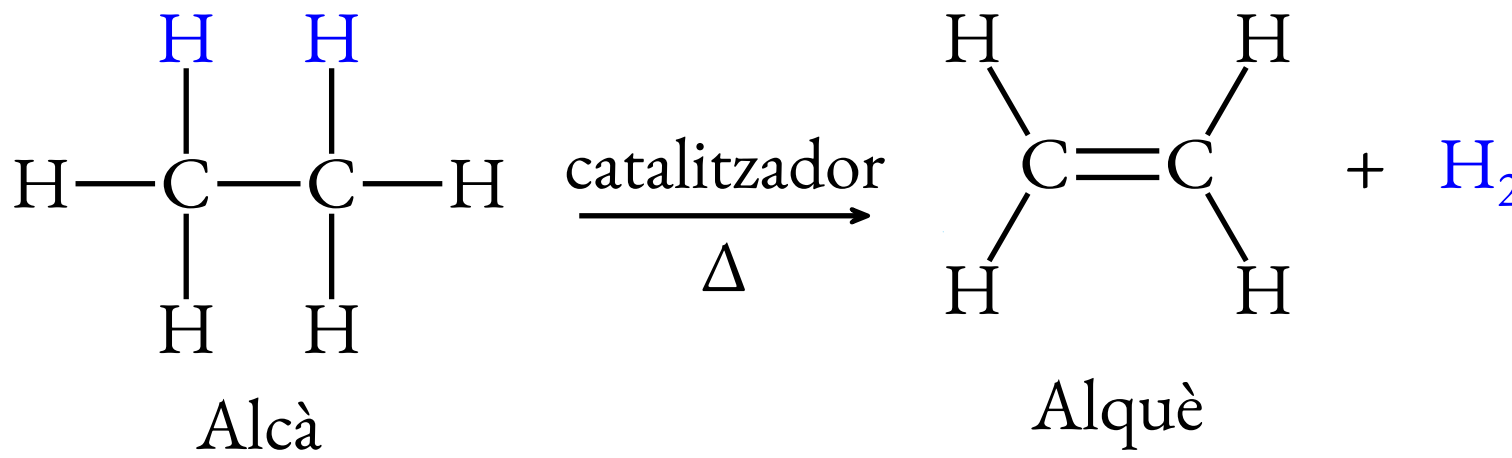


### Reaccions d'eliminació

Una molècula perd àtoms en posicions adjacents i origina una molècula amb un enllaç doble o triple. Les reaccions d'eliminació són les reaccions inverses a les d'addició a un doble enllaç. A les reaccions d'eliminació es perden àtoms de dos carbonis veïnals produint-se majoritàriament el **doble enllaç més substituït**.

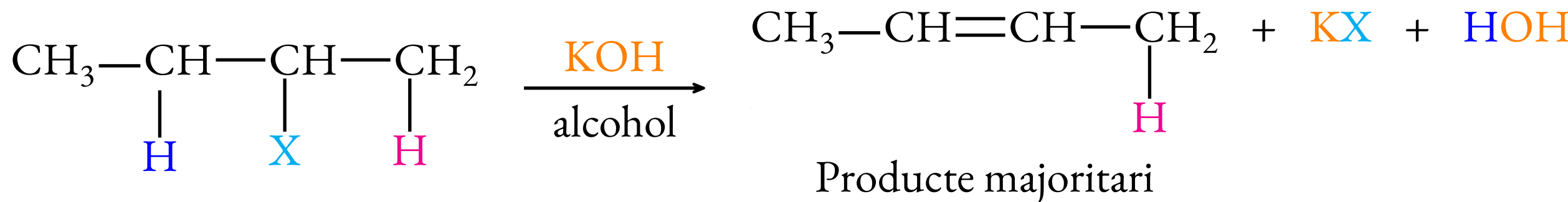
#### Deshidrogenació

És la reacció inversa a la hidrogenació, i es dona amb un catalitzador i calor, donant l'alquè:



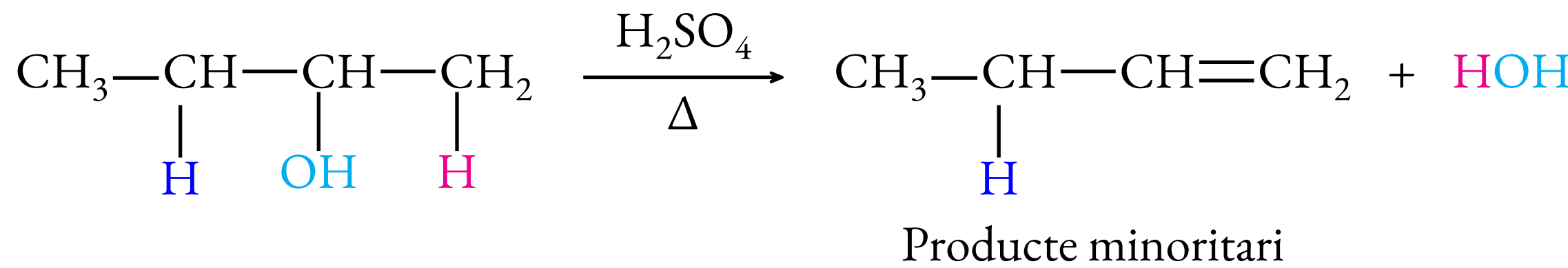
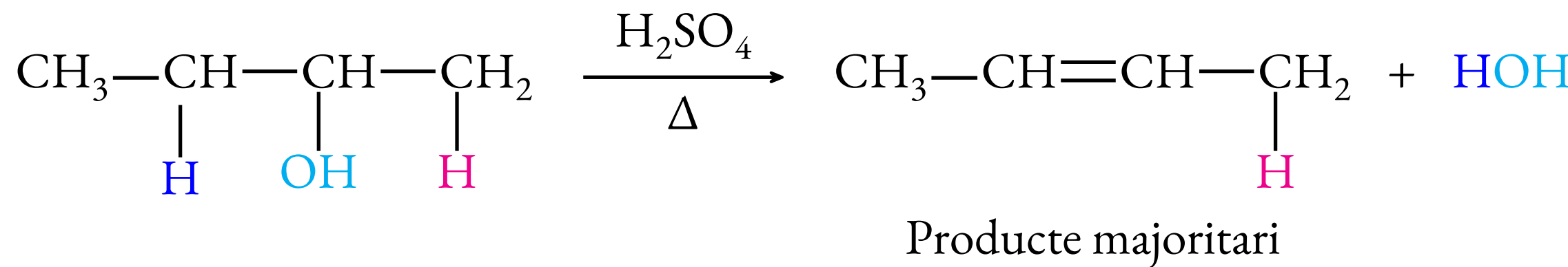
#### Deshidrohalogenació d'halurs d'alquil

És la reacció inversa a la hidrohalogenació, es produeix en presència de  $KOH$  i alcohol en la qual s'elimina  $KX$  i  $H_2O$ , originant un doble enllaç. La deshidrohalogenació produeix majoritàriament el producte amb el doble enllaç més substituït:



#### Deshidratació d'alcohols

És la reacció inversa a la hidratació d'alcohols. Es produeix en medi àcid, generalment  $H_2SO_4$ , i calor. La deshidratació (pèrdua d'una molècula d'aigua) produeix, majoritàriament, el doble enllaç més substituït:



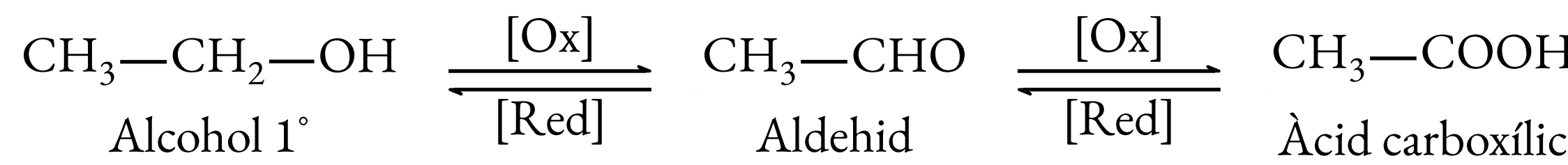
### Reaccions d'oxidació-reducció (redox)

A les **reaccions d'oxidació**, el carboni que té unit un hidroxil ( $-OH$ ) s'oxida. Aquesta oxidació té lloc per pèrdua d'un hidrogen unit al C de l'hidrogen del grup  $-OH$ , formant-se un doble enllaç  $C=O$  conegut com a grup carbonil. Com a substància oxidant  $[Ox]$  pot usar-se dicromat de potassi  $K_2Cr_2O_7$  o permanganat de potassi  $KMnO_4$  en medi àcid.

La reacció inversa a l'oxidació és la **reducció**. Com a substància reductora  $[Red]$  sol usar-se tetrahidrur d'alumini-liti,  $LiAlH_4$ .

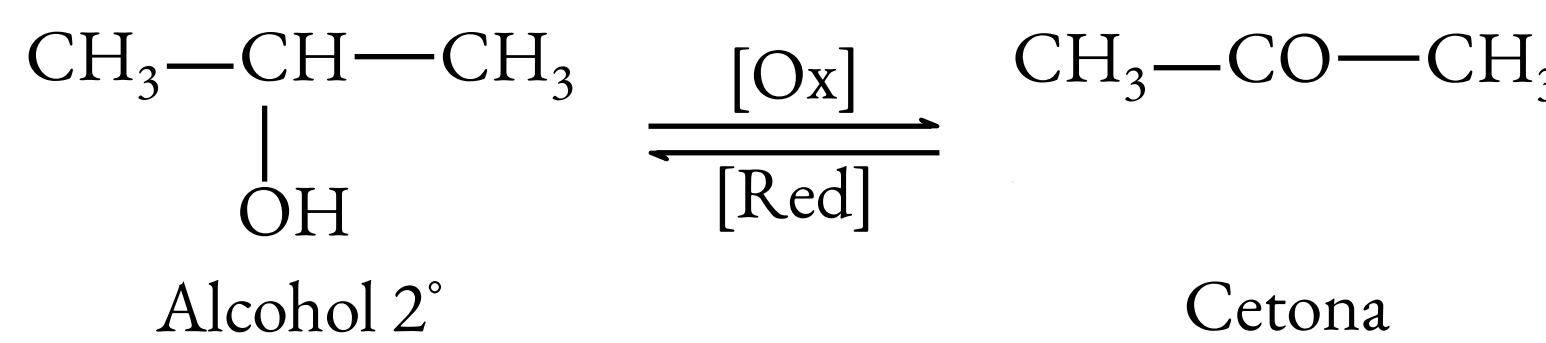
#### Alcohols primaris

Com en els ALCOHOLS PRIMARIS el grup  $-OH$  està unit a un carboni terminal, en oxidar-se produeix un carbonil terminal donant lloc a un ALDEHID,  $-CHO$ . Si l'oxidació continua l'aldehid s'oxida a ÀCID CARBOXÍLIC:



#### Alcohols secundaris

En el cas dels ALCOHOLS SECUNDARIS, l'oxidació del carboni produeix un carbonil no terminal, conegut com a grup CETONA. La cetona no pot continuar oxidant-se:

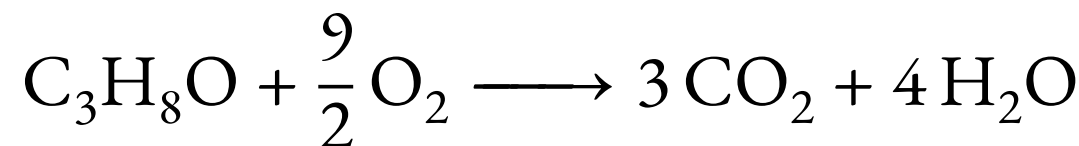


#### Alcohols terciaris

L'oxidació es produiria per pèrdua d'un hidrogen unit al carboni que s'oxidaria, per la qual cosa aquest ha de tenir disponible almenys un. Per aquest motiu, els ALCOHOLS TERCIARIS no donen reaccions d'oxidació.

#### Reaccions de combustió

La reacció de combustió d'un compost orgànic en atmosfera rica en oxigen dona lloc als òxids dels seus elements. Si el compost és un hidrocarbur, oxigenat o no, els productes de la reacció són diòxid de carboni i aigua, que són els òxids del carboni i de l'hidrogen:

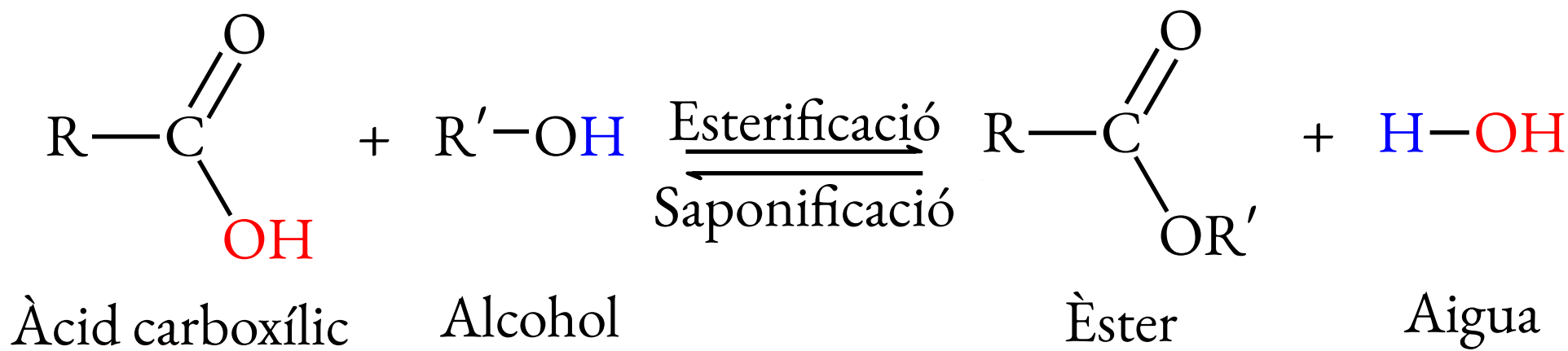


Les reaccions de combustió són reaccions exotèrmiques. Si el compost té altres elements, com a N o S, també habituals en química orgànica, s'obtenen els òxids d'aquests.

### Reaccions de condensació i hidròlisi

#### Reacció d'esterificació i saponificació

L'ESTERIFICACIÓ és la reacció de CONDENSACIÓ entre un àcid carboxílic i un alcohol, per pèrdua d'aigua, produint-se un èster:



La SAPONIFICACIÓ és la reacció inversa a l'esterificació. La hidròlisi de l'èster dona l'àcid carboxílic i l'alcohol. S'entén per saponificació la reacció que produeix la formació de sabons. La principal causa és la dissociació dels greixos en un medi alcalí, separant-se glicerina i àcids grassos. Aquests últims s'associen immediatament amb els àlcalis constituint les sals sòdiques dels àcids grassos: el sabó.