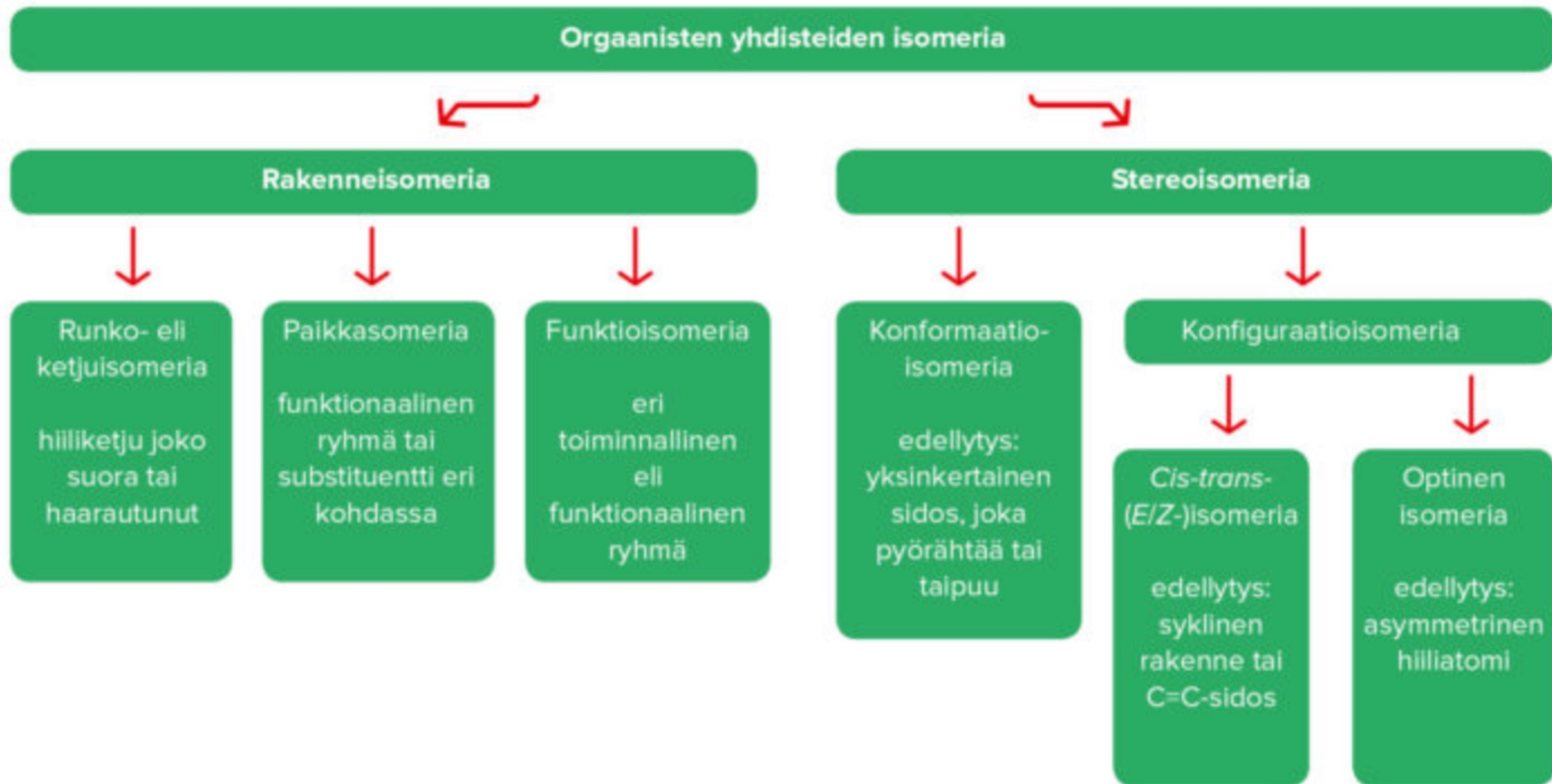




# Orgaanisten aineiden isomeria

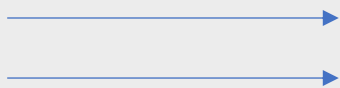
# ORGAANISTEN YHDISTEIDEN ISOMERIA



## Luvun 6.1 tavoitteet

- selittää, mitä rakenneisomeria tarkoittaa ja osaa nimetä rakenneisomerian lajit.
- päätellä, minkä tyyppistä rakenneisomeriaa yhdisteellä voi olla.
- piirtää eri rakenneisomeerien rakennekaavat täsmällisesti kemian yo-kokeessa käytettävällä ohjelmalla
- nimetä (aiemmin opiskeltujen nimityssääntöjä soveltaen) rakenteeltaan yksinkertaiset isomeerit.
- ennustaa, vertailla ja tehdä johtopäätöksiä rakenneisomeerien erilaisista ominaisuuksista (sulamis- ja kiehumispiste, liukoisuus veteen ja poolittomaan liuottimeen).
- selittää rakenneisomeerien erilaisia ominaisuuksia aiemmin opiskeltujen mallien ja käsitteiden (molekyylien koko, muoto, poolisuus ja molekyylien väliset sidokset) avulla.
- selittää, miksi joidenkin paikkaisomeerien (esimerkiksi primääriset, sekundääriset ja tertiääriset alkoholit) ja funktioisomeerien kemialliset ominaisuudet eroavat.

Isomeria on  
molekyylien  
erilaista  
sitoutumista ja  
avaruudellista  
suuntautumista



Fysikaaliset ja kemialliset  
ominaisuudet eroavat toisistaan

# Rakenneisomeria

- Yhdisteet, jolla on sama molekyylikaava mutta eri rakennekaava.

## Isomeria



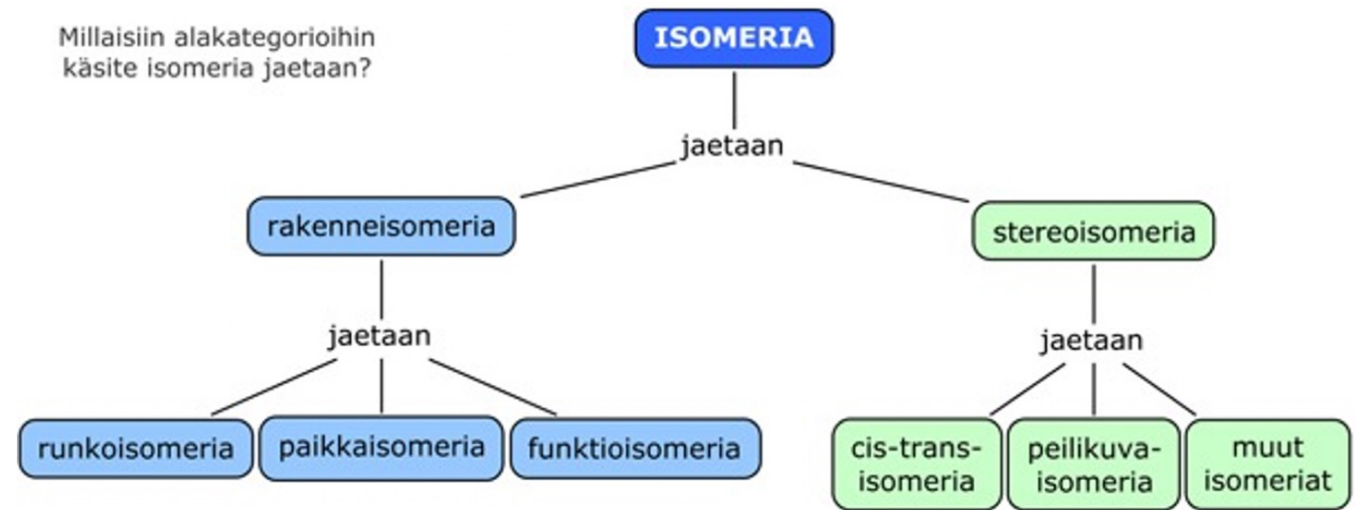
Jos kahdella aineella on eri sidosrakenne mutta sama molekyylikaava, aineita kutsutaan **isomeereiksi**. Isomeerien fysikaaliset ja kemialliset ominaisuudet eroavat toisistaan.

Eri isomeerit voidaan jakaa kahteen pääluokkaan:

1. **rakenneisomeerit**, joissa atomit ovat sitoutuneet toisiinsa eri järjestyksessä.
2. **stereoisomeerit**, jotka eroavat toisistaan vain siten, että atomit ovat suuntautuneet eri suuntiin avaruudessa.

# ISOMERIA

Millaisiin alakategorioihin  
käsite isomeria jaetaan?

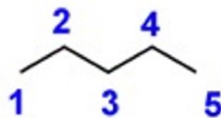
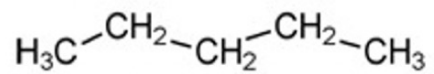




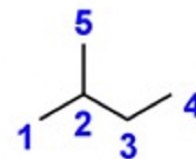
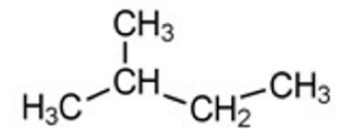
# Runkoisomeria

## Runkoisomeria

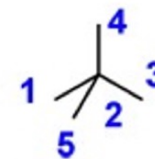
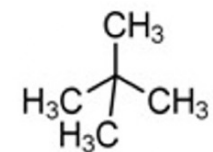
**pentaani**



**2-metyylibutaani**



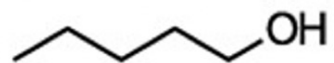
**2,2-dimetyylipropaani**



# Paikkaisomeria

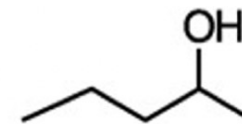


1-pentanol



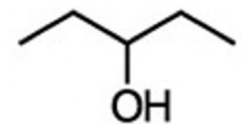
primäärinen  
alkoholi

2-pentanol



sekundäärinen  
alkoholi

3-pentanol



sekundäärinen  
alkoholi

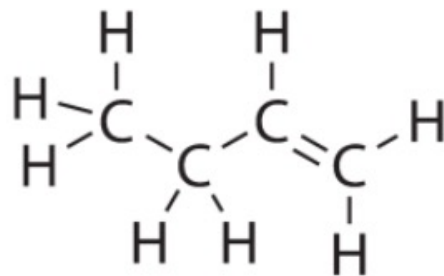


## ESIMERKKI 1 PAIKKAISOMEERIEN RAKENNEKAAVAT JA NIMEÄMINEN

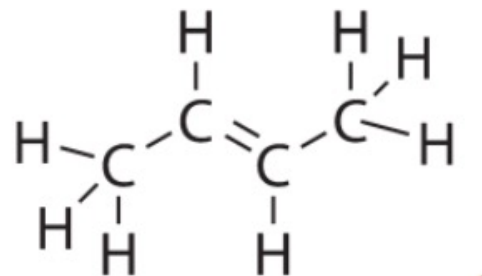
Piirrä molekyylikaavaa  $C_4H_8$  vastaavien paikkaisomeerien täydelliset rakennekaavat ja nimeä isomeerit. Mallinna isomeerejä myös viivakaavalla.

## MALLIRATKAISU

Täydelliset rakennekaavat ja nimet ovat:



but-1-eeni

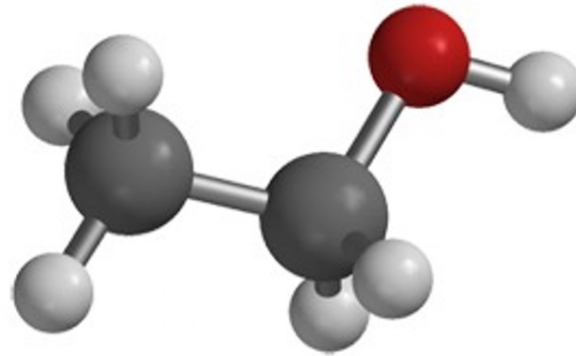


but-2-eeni

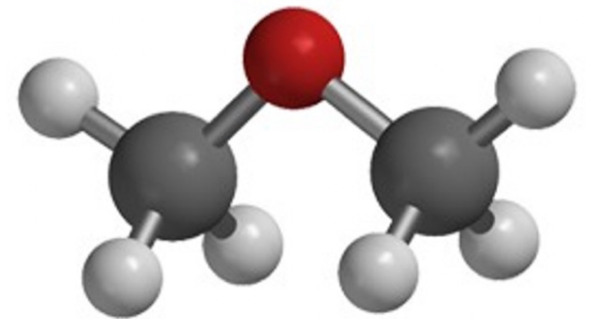
Viivakaavat ovat:



# Funktioisomeria



Etanoli,  $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$



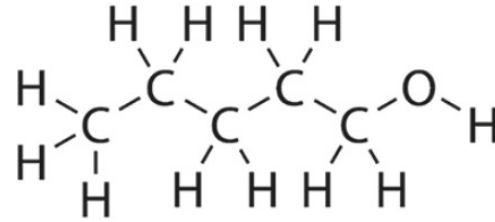
Dimetyyliketoni, asetoni,  $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$

## ESIMERKKI 2 FUNKTIOISOMEERIEN RAKENNEKAAVAT JA NIMEÄMINEN

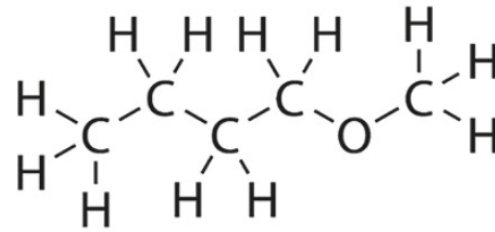
Esitä sellaisten pentan-1-olin funktioisomeerien täydelliset rakennekaavat, joissa hiilivetyketju on suora. Nimeä isomeerit. Mihin yhdisteryhmään funktioisomeerit voidaan luokitella?

# MALLIRATKAISU

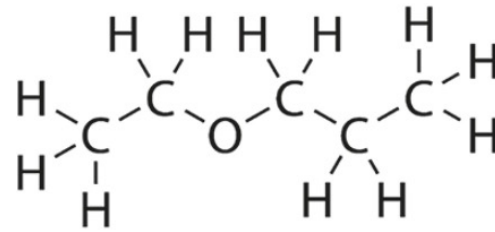
Pentan-1-olin täydellinen rakennekaava on



Funktioisomeerien täydelliset rakennekaavat ja nimet ovat:



butyylimetyylieetteri

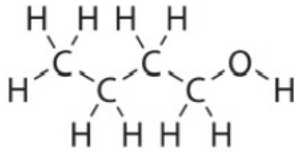
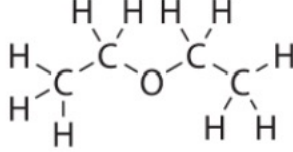
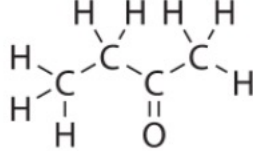
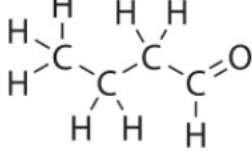
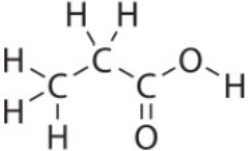
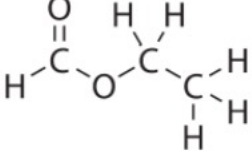
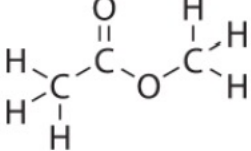


etyylipropyylieetteri

Isomeerit ovat eettereitä.

Taulukossa 16 on esitetty yhteenveto tavallisimmista happea sisältävistä orgaanista yhdisteryhmistä, jotka voivat olla keskenään funktioisomeerejä.

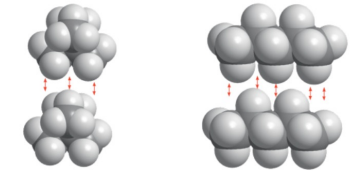
Taulukko 16. Esimerkkejä happiyhdisteiden funktioisomeriasta

| Keskenään funktioisomeerejä voivat olla | Funktionaaliset ryhmät | Esimerkkejä yhdisteistä, jotka ovat keskenään funktioisomeerejä                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|-----------------------------------------|------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| alkoholit<br>ja<br>eetterit             | R-OH<br><br>R-O-R      | <div>  <br/>butan-1-oli </div> <div>  <br/>dietyylieetteri </div>                                                                                                                                 |
| ketonit<br>ja<br>aldehydit              | R-CO-R<br><br>R-CHO    | <div>  <br/>butan-2-oni </div> <div>  <br/>butanaali </div>                                                                                                                                       |
| karboksyylihapot<br>ja<br>esterit       | R-COOH<br><br>R-COO-R  | <div>  <br/>propaanihappo </div> <div>  <br/>etyylimetanaatti </div> <div>  <br/>metyylietanaatti </div> |



# OMINAISUUDET

A. Mitä haarautuneempi ketju, sitä pienemmälle pinta-alalle poolittomien hiilivetyketjujen välisiä dispersiovoimia syntyy ja sitä alhaisempi isomeerin sulamis- tai kiehumispiste on

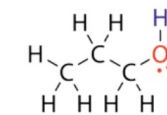
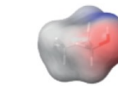


2,2-dimetyylipropaani  
kiehumispiste 10 °C

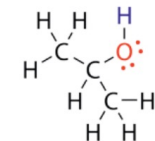
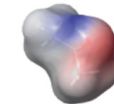
pentaani  
kiehumispiste 36 °C

Kuva 72. 2,2-dimetyylipropaani ja pentaani ovat keskenään runkoisomeereja. 2,2-dimetyylipropaanin kiehumispiste on huomattavasti alhaisempi, koska molekyylien välille muodostuvat dispersiovoimat vaikuttavat pienemmällä alalla.

B. Paikkaisomeerien sulamis- ja kiehumispisteeseen vaikuttaa esimerkiksi se, onko funktionaalinen ryhmä hiilivetyketjun päässä vai hiilivetyketjun keskellä.



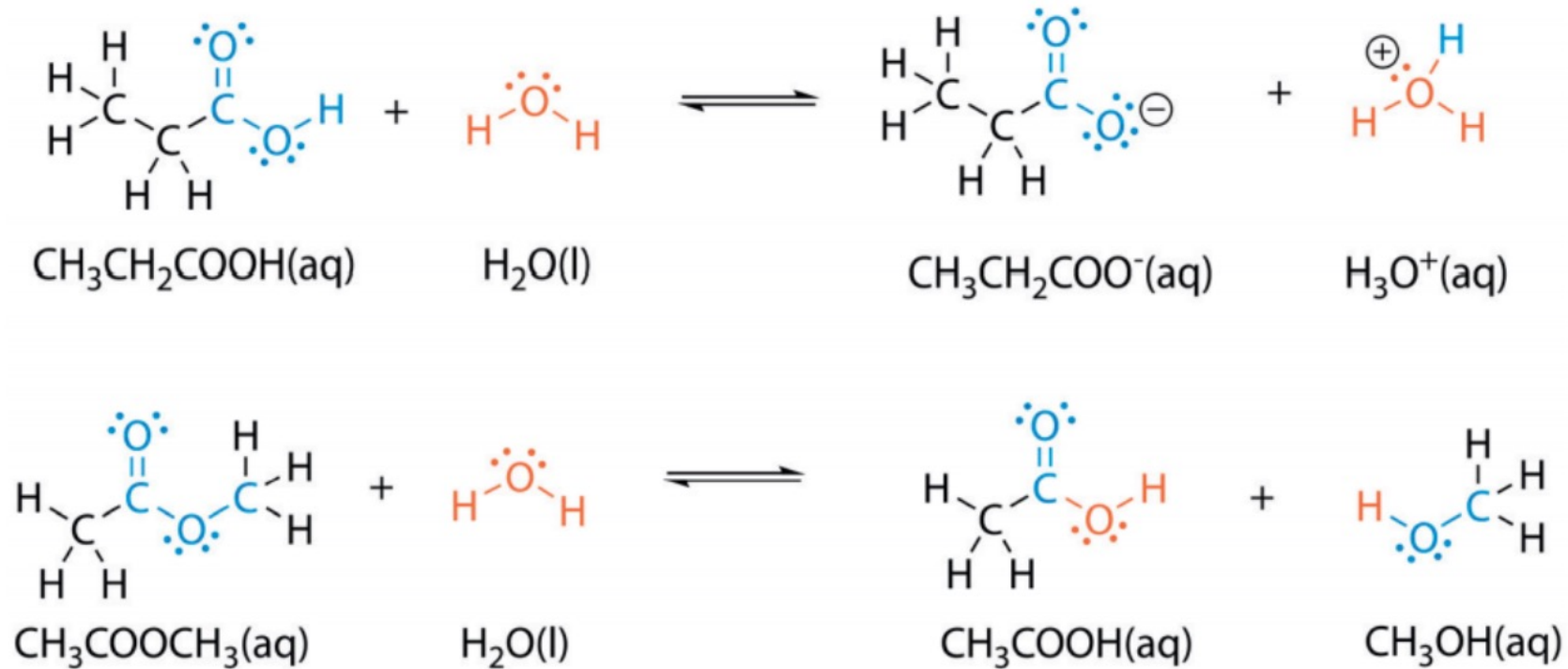
propan-1-oli  
kiehumispiste 97 °C



propan-2-oli  
kiehumispiste 82 °C

Kuva 73. Propan-1-olin kiehumispiste on korkeampi kuin propan-2-olin kiehumispiste. Tämä selittyy sillä, että propan-1-olimolekyylien välille muodostuu helpommin vetysidoksia, koska hydroksiryhmä on hiilivetyketjun päässä.

Esimerkiksi vesiliuoksessa propaanihapolle ( $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}$ ) tapahtuu protoninsiirtoreaktio, jossa propaanihappomolekyyli luovuttaa protonin. Propaanihapon funktioisomeerille, metyylietanaatille ( $\text{CH}_3\text{COOCH}_3$ ), tapahtuu hydrolyysireaktio, jossa vesi pilkkoo esterin (kuva 76).



Kuva 76. Funktioisomeereilla on erilaisia kemiallisia ominaisuuksia, sillä eri funktionaaliset ryhmät reagoivat eri tavoin.

**Stereoisomeereiksi** eli avaruusisomeereiksi kutsutaan yhdisteitä, joissa atomeilla on sama sitoutumisjärjestys, mutta joissa sidokset ovat suuntautuneet avaruudellisesti eri tavoin.

**Stereoisomeriaa** on kahta eri lajia:

- 1) konformaatioisomeria
- 2) konfiguraatioisomeria.

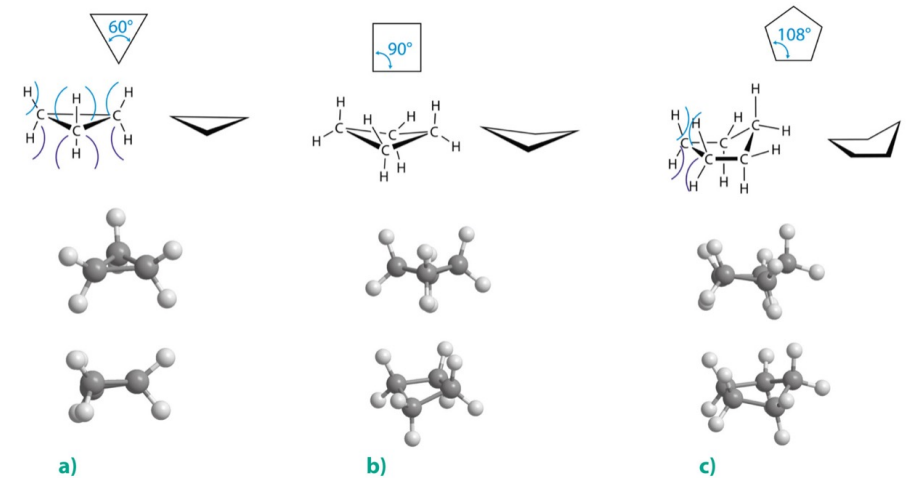
**Konformaatioisomeria** perustuu yksinkertaisten sidosten kiertymiseen sidosakselin ympäri. Konformaatiot muuttuvat jatkuvasti toisikseen lämpöliikkeen takia.

---

**Konfiguraatioisomeerit** sen sijaan ovat pysyviä stereoisomeerejä. Ne voivat muuttua toisikseen vain, jos kovalenttisia sidoksia katkaistaan ja sidokset muodostuvat uudestaan.

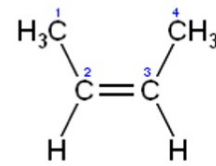
Konformaatioisomeriaa voi esiintyä molekyyleillä, joissa atomien välillä on yksinkertaisia kovalenttisia sidoksia eli  $\sigma$ -sidoksia.

Yksinkertaiset sidokset kiertyvät vapaasti sidosakselinsa ympäri lämmön vaikutuksesta. Näin muodostuvia erilaisia kolmiulotteisia rakenteita sanotaan molekyylin **konformaatioiksi**

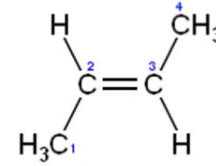


Kuva 81. Syklopropanilla a) ja syklobutaanilla b) on voimakas rengasjännitys, johon vaikuttavat muun muassa epäedulliset sidoskulmat. Syklopentaanin c) sidoskulmat ovat lähellä ideaalia (109,5°), jolloin rengasjännitys on edellisiä renkaita pienempi. Epäedullisten sidoskulmien lisäksi myös C-H-sidosten kohdakkaisuus kasvattaa rengasjännitystä. Kohdakkain olevat C-H-sidokset on merkitty sinisellä kaariviivalla.

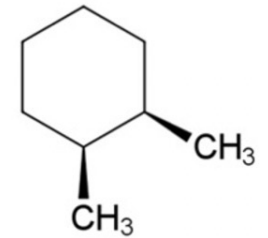
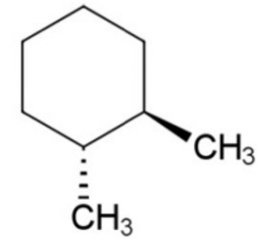
# cis-trans-isomeria



cis-2-buteeni



trans-2-buteeni



trans- ja cis-1,2,-dimetyylisyklo-  
heksaani

