

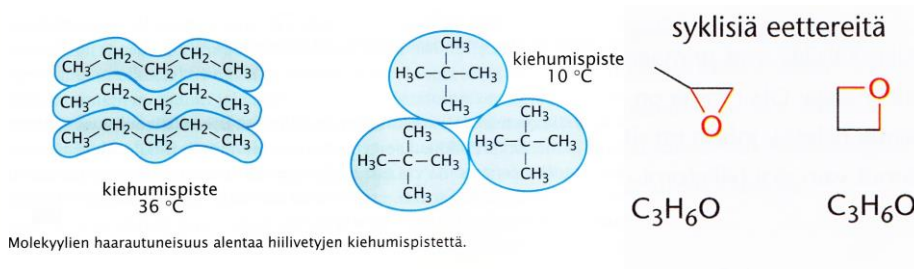
Rakenne- eli konstituutioisomeria

Kolme alalajia: **1)** funktio- eli toiminnallisen ryhmän isomeria, **2)** runko- eli ketjuisomeria ja **3)** paikkaisomeria.

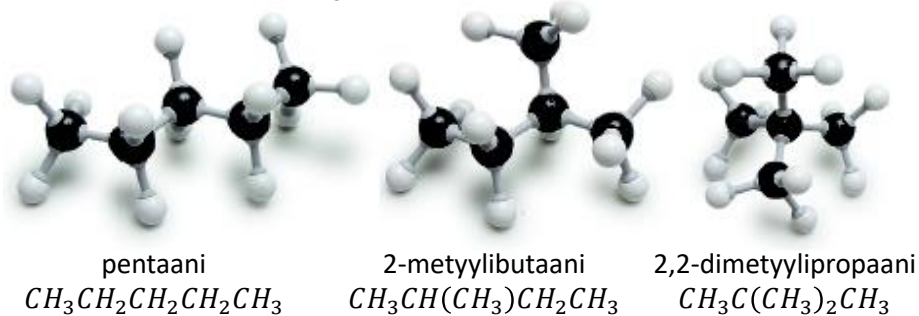
Määritelmä, runko- eli ketjuisomeria:

Ketju- eli runkoisomeria on rakenneisomerian laji, jossa isomeerien hiiliketju on eri tavoin haarautunut. (Molekyylissä on siis sama määrä atomeja.)

Hiilirunko voi olla joko suora tai haaroittunut ja haarojakin voi olla useita. Mahdollisten isomeerien lukumäärä kasvaa erittäin nopeasti, kun hiilten lukumäärä kasvaa. Rungossa voi olla myös renkaita, eli ns. syklo-rakenne.

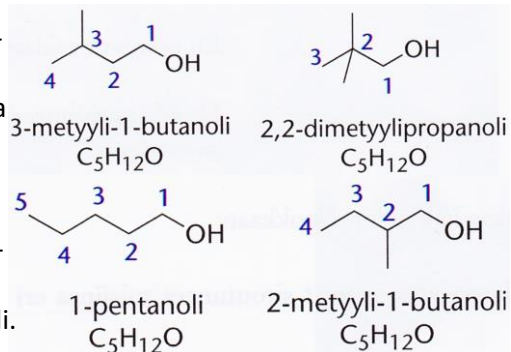


Esimerkki: Yhdisteen C_5H_{12} runkoisomeerit:



Esimerkki: Kun hiilirungossa on kiinni funktionaalinen ryhmä, runkoisomeerejä saadaan pelkkää hiilirunkoa muokkaamalla.

Yhdisteen $C_5H_{12}O$ runkoisomeerit: Funktionaalisenä ryhmänä OH-ryhmä. Nämä kaikki ovat primäärisiä alkoholeja, eli OH-ryhmä on kiinni hiilessä, johon on sitoutunut vain 1 hiili.



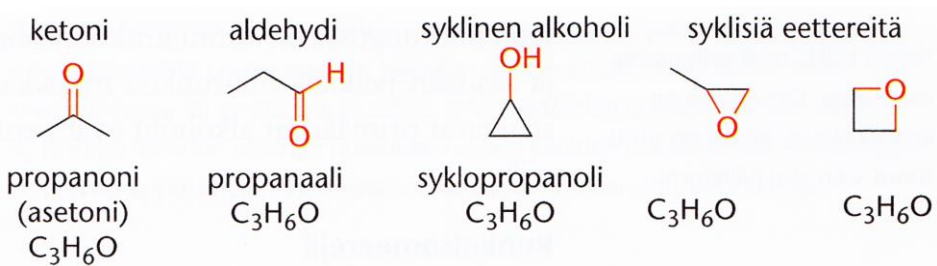
Funktioisomeria

Määritelmä, funktioisomeria:

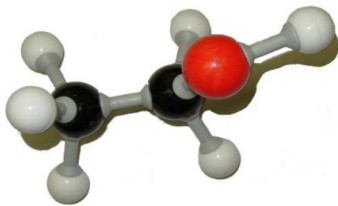
Funktioisomeria on rakenneisomerian laji, jossa isomeereilla on eri toiminnallinen eli funktionaalinen ryhmä.

Funktioisomeerit on helppo erottaa ja tunnistaa eri yhdisteiksi. Koska näillä isomeereilla on eri toiminnallinen ryhmä, niillä on myös erilaiset kemialliset ja fysikaaliset (esim. sulamispiste) ominaisuudet.

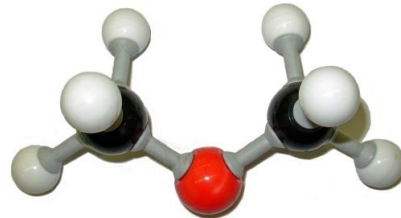
Esimerkki: Yhdisteen C_3H_6O funktioisomeerejä:



Esimerkki: a) Yhdisteen C_2H_6O funktioisomeerit:

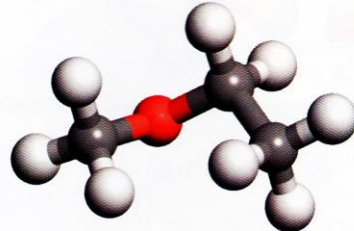
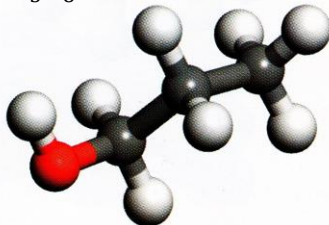


etanoli
 CH_3CH_2OH



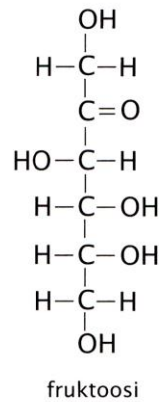
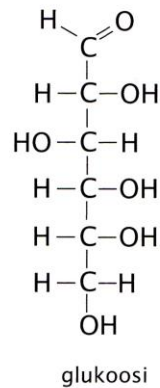
dimetyylieetteri
 CH_3OCH_3

b) Yhdisteen C_3H_8O funktioisomeerit:



1-propanoli ja etyylimetyylieetteri ovat toistensa funktioisomeereja.

HAPPIYHDISTEIDEN FUNKTIOISOMERIA			
Molekyylikaava	Mahdolliset yhdisteryhmät	Funktionaaliset ryhmät	Esimerkkejä isomeereista
$C_4H_{10}O$	alkoholi ja eetteri	-OH -O-	$\begin{array}{c} H & H & H & H \\ & & & \\ H-C & -C & -C & -C-OH \\ & & & \\ H & H & H & H \end{array}$ 1-butanoli $\begin{array}{c} H & H & & H & H \\ & & & & \\ H-C & -C & -O & -C & -C-H \\ & & & & \\ H & H & & H & H \end{array}$ dietyylieetteri
C_4H_8O	ketoni ja aldehydi	-CO- -CHO	$\begin{array}{c} H & O & H & H \\ & & & \\ H-C & -C & -C & -C-H \\ & & & \\ H & & H & H \end{array}$ butanoni $\begin{array}{c} H & H & H & O \\ & & & \\ H-C & -C & -C & -C-H \\ & & & \\ H & H & H & H \end{array}$ butanaali
$C_3H_6O_2$	karboksyylihappo ja esteri	-COOH -COO-	$\begin{array}{c} H & H & O \\ & & \\ H-C & -C & -C-OH \\ & & \\ H & H & \end{array}$ propaanihappo $\begin{array}{c} O & H & H \\ & & \\ H-C & -O & -C & -C-H \\ & & & \\ & & H & H \end{array}$ metaanihapon etyyliesteri $\begin{array}{c} H & O & H \\ & & \\ H-C & -C & -O & -C & -H \\ & & & \\ H & & & H \end{array}$ etaanihapon metyyliesteri

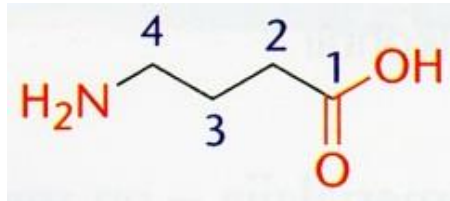


Myös monet monosakkaridit, kuten glukoosi ja fruktoosi, ovat toistensa funktioisomeereja. Molempien sokerien molekyylikaava on $C_6H_{12}O_6$, mutta avoketjuisessa glukoosimolekyylissä funktionaalinen ryhmä on aldehydiryhmä, avoketjuisessa fruktoosissa puolestaan ketoryhmä. Kun nautimme fruktoosia, elimistömme isomeraasientsyymi muuttaa sen glukoosiksi, jota sitten hyödynämme energialähteenä.

Miten nimetään yhdiste, jossa on useita eri funktionaalisia ryhmiä?

- Jos molekyylissä on useampi kuin yksi funktionaalinen ryhmä, valitaan yksi niistä perusosan päätteen määrääväksi ryhmäksi ja loput funktionaaliset ryhmät nimetään sivuryhminä.
- Numerointi aloitetaan päätteen määräävästä ryhmästä.
- Päätteen valintaan käytetään järjestystä
 1. karboksyylihappo
 2. esteri
 3. amidi (-CONH₂)
 4. nitrili (-CN)
 5. aldehydi
 6. ketoni
 7. alkoholi
 8. amiini
 9. alkeeni
 10. alkyyni
 11. alkaani

Nimeä yhdiste.



Vastaus: 4-aminobutaanihappo

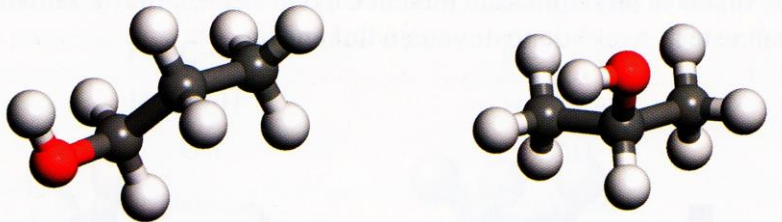
Paikkaisomeria

Määritelmä, paikkaisomeria:

Paikkaisomeria on rakenneisomerian laji, jossa saman funktionaalisen ryhmän paikka molekyylissä vaihtelee.

Paikkaisomeereillä voi olla hyvinkin erilaisia fysikaalisia ja kemiallisia ominaisuuksia → katso esimerkit.

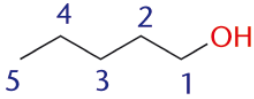
Esimerkki: 1- ja 2-propanolit ovat paikkaisomeerejä. 1-propanolin kiehumispiste on 97°C johtuen vetysidoksista, kun taas 2-propanolin 82°C. 1-propanoli hapettuu aldehydin kautta hapoksi, kun taas 2-propanoli hapettuu ketoniksi.



1- ja 2-propanoli ovat toistensa paikkaisomeereja.

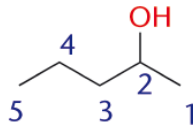
Esimerkki: Yhdisteen $C_5H_{12}O$ paikkaisomeerit:

Paikkaisomeerejä



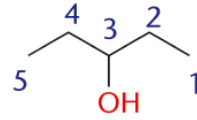
1-pentanol
 $C_5H_{12}O$

primäärinen
alkoholi



2-pentanol
 $C_5H_{12}O$

sekundäärinen
alkoholi



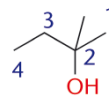
3-pentanol
 $C_5H_{12}O$

sekundäärinen
alkoholi

Esimerkki: Mikäänhän ei estä yhdistelemästä paikka- ja runkoisomerialajeja.

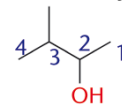
Esimerkiksi 1-pentanolille (dia 2) $C_5H_{12}O$ saadaan yhteensä 7 muuta paikka- tai runkoisomeeriä, joista kolme on jo esitelty (dia 2) ja tällä dialla 4 muuta.

Sekä paikka- että runkoisomeerejä



2-metyyli-2-butanoli
 $C_5H_{12}O$

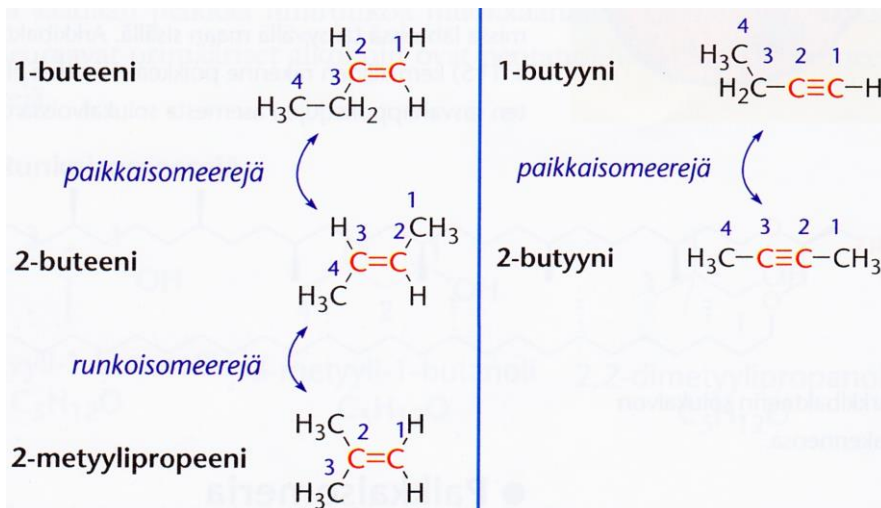
tertiäärinen
alkoholi



3-metyyli-2-butanoli
 $C_5H_{12}O$

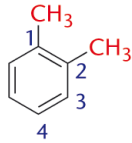
sekundäärinen
alkoholi

Esimerkki: Myös alkeeneilla ja alkyneilla voi esiintyä paikka- ja runkoisomeriaa.

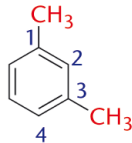


Esimerkki: Jos bentseenirenkaaseen on kiinnittynyt kaksi tai useampi sivuryhmä, voi esiintyä paikkaisomeriaa. Tällöin nimeämisessä voi käyttää joko numeroita tai sanoja **orto**, **meta** ja **para**, joista jokainen viittaa tiettyyn rakenteeseen → katso kuvat alla.

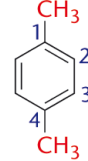
Aromaattisten yhdisteiden paikkaisomeerejä



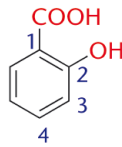
1,2-dimetyylibentseeni
eli orto-ksyleeni



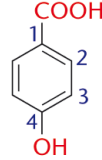
1,3-dimetyylibentseeni
eli meta-ksyleeni



1,4-dimetyylibentseeni
eli para-ksyleeni



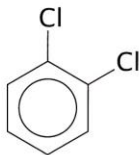
2-hydroksibentsoehappo
salisyylihappo
lievittää kipua



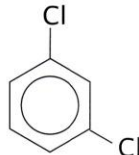
4-hydroksibentsoehappo
ei kipua lievittävää vaikutusta

Piirrä diklooribentseenin kaikkien paikkaisomeerien rakennekaavat ja nimeä ne.

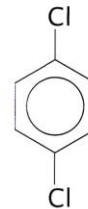
Ratkaisu:



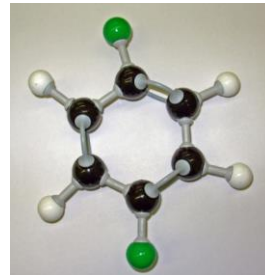
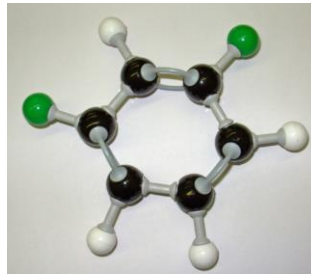
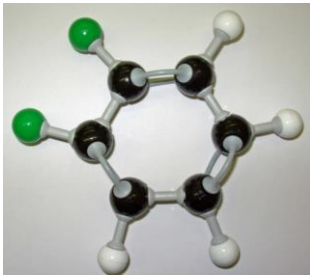
1,2-diklooribentseeni
orto-diklooribentseeni



1,3-diklooribentseeni
meta-diklooribentseeni



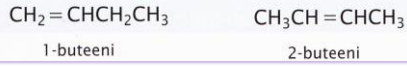
1,4-diklooribentseeni
para-diklooribentseeni



Kertausta

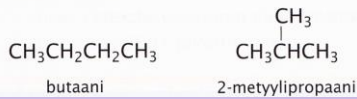
Paikkaisomeria

Esiintyy funktionaalisen ryhmän sisältävillä isomeereilla. Tällöin funktionaalisen ryhmän paikka vaihtuu. Esimerkiksi buteenilla on seuraavat paikkaisomeerit:



Ketju- eli runkoisomeria

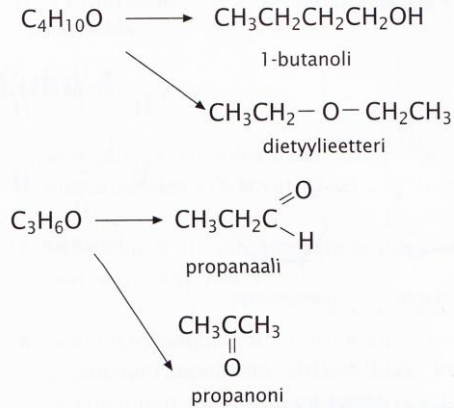
Isomeereilla on eri tavoin haaroittunut hiiliketju. Esimerkiksi molekyylikaavaa C_4H_{10} vastaa kaksi erilaista rakennekaavaa.



Funktio- eli yhdistetyyppi-isomeria

Tässä iserialajissa isomeereilla on sama molekyylikaava, mutta rakennekaavassa on eri funktionaalinen ryhmä.

Esimerkiksi



Jäikö mieleen?

- Mitä käsite isomeria tarkoittaa?
- Mitä yhteistä ja mitä eroa on yhdisteen
 - a) rakenneisomeereillä b) avaruusisomeereillä?
- Mitä rakenneisomeria on?
- Mitkä rakenneisomerian lajit ovat?
- Miten eroavat toisistaan
 - a) paikkaisomeerit b) funktioisomeerit c) runkoisomeerit?