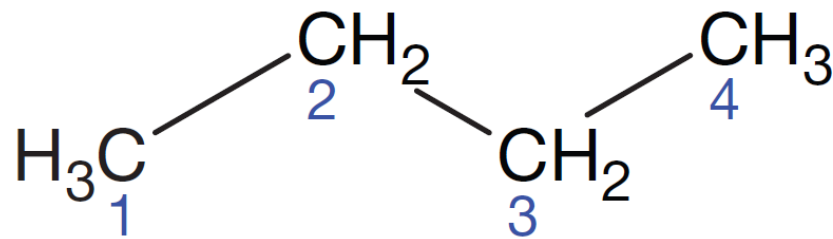




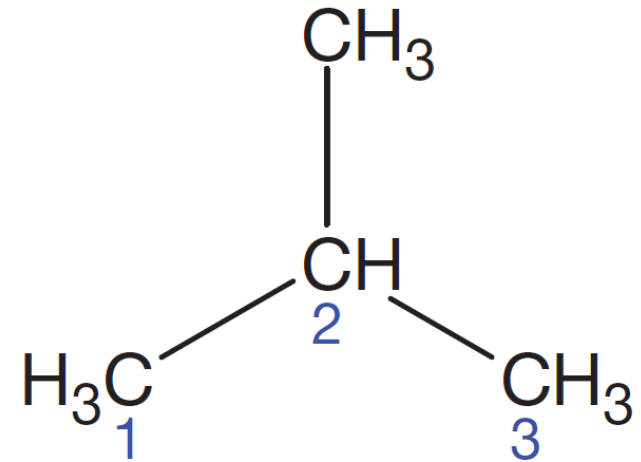
# 49. Az izoméria

# Az izoméria

- ▶ az a jelenség, amikor egy összegképlethez több különböző szerkezetű molekula tartozik
- ▶ pl. a  $C_4H_{10}$  összegképletű alkánhoz kétféle szerkezet tartozik



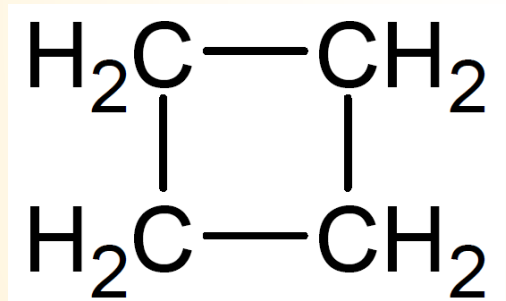
*n*-bután



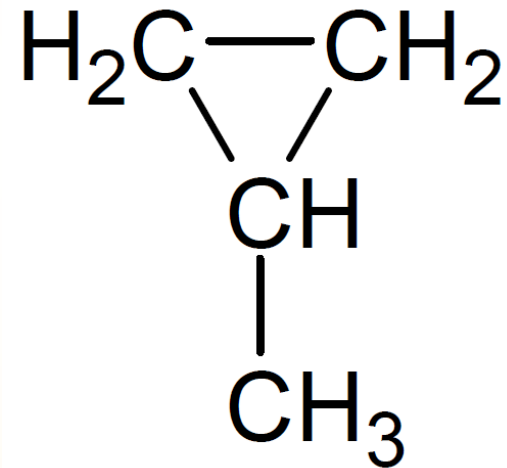
2-metilpropán

# Konstitúciós izoméria a cikloalkánok esetében

- pl. a  $C_4H_8$  összegképlethez is két konstitúciós izomer tartozik



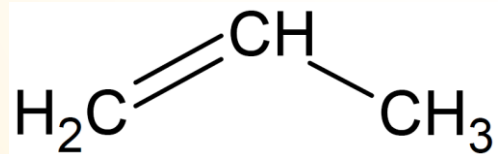
ciklobután



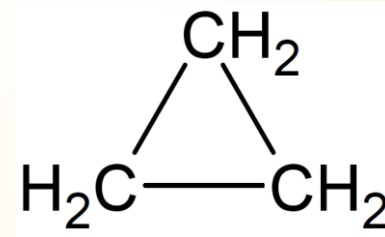
metilciklopropán

# A konstitúciós izoméria

- ▶ konstitúció: az atomok kapcsolódási sorrendje
- ▶ konstitúciós izoméria: az izomériának az a fajtája, amikor az összegképlet megegyezik, de az atomok kapcsolódási sorrendje eltér
- ▶ következményei: eltérő fizikai és/vagy kémiai tulajdonságok



propén



ciklopropán

# A konfiguráció

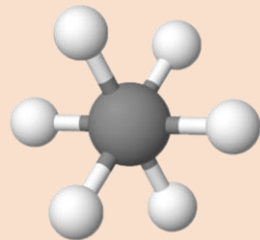
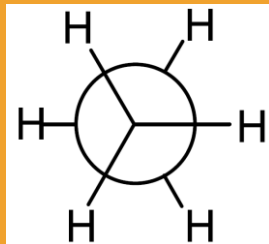
- ▶ a szénatomhoz közvetlenül kapcsolódó atomok, illetve atomcsoportok térbeli elrendeződése

# A konformáció

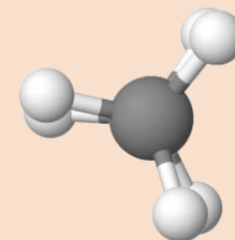
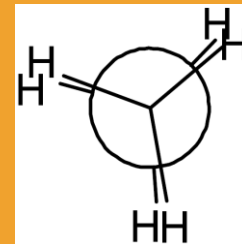
- ▶ a molekula kovalens kötéssel egymással nem kapcsolódó atomjainak, illetve atomcsoportjainak térbeli elrendeződése
- ▶ konformerek: az egyszeres kovalens kötés mentén történő elfordulással létrejövő szerkezetek

# A konformáció – az etán

- ▶ a C–C-tengely felől nézve kétféle etán konformert figyelhetünk meg
  - ▶ valójában végtelen számú konformer van, a táblázatban szereplő két konformer csak a két végletet jelöli

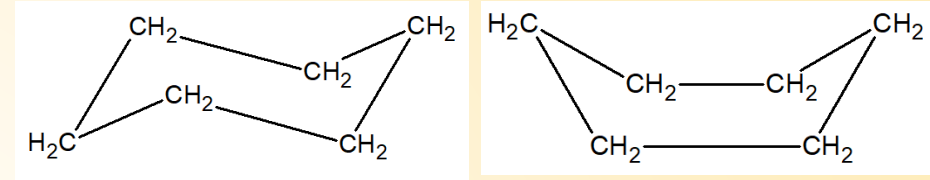


„nyitott” állás  
(a legstabilisabb konformáció)

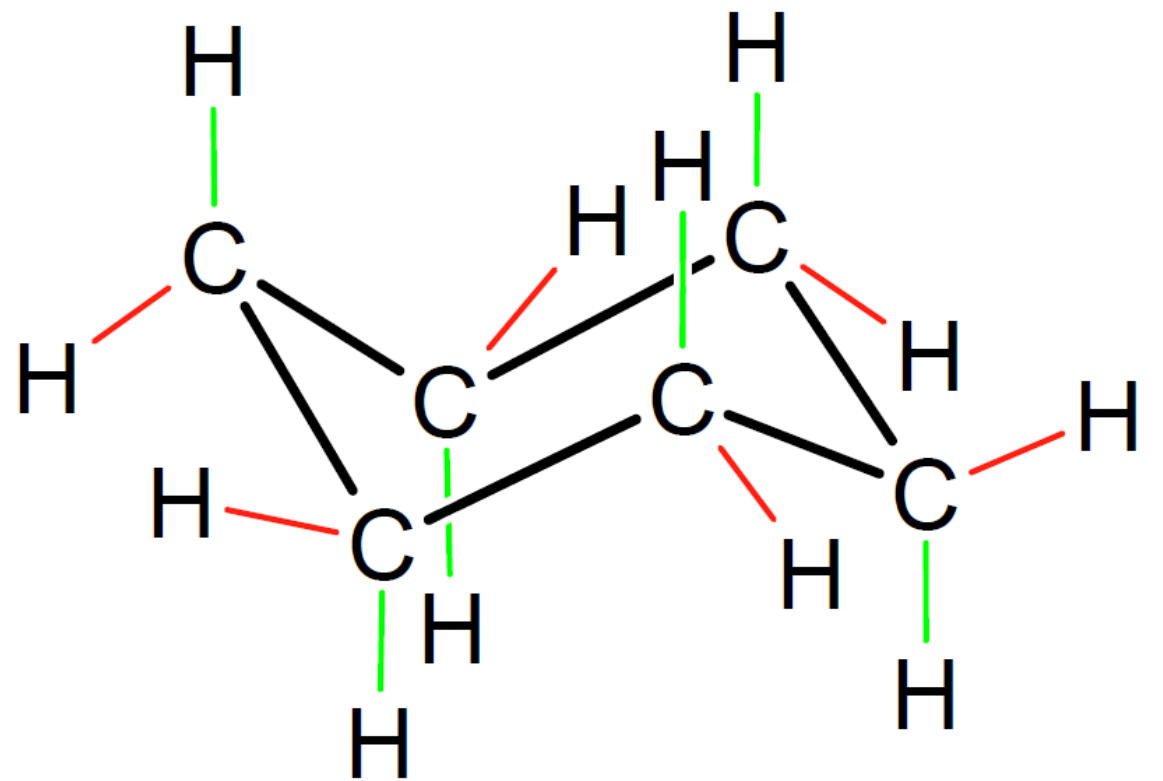


„fedő” állás  
(a legkevésbé stabilis konformáció)

# A konformáció – a ciklohexán



- ▶ szék- és kádkonformáció
- ▶ a székkonformáció az energetikailag stabilisabb
- ▶ a székkonformációban **axiális** és **ekvatoriális** helyzetű hidrogénatomok



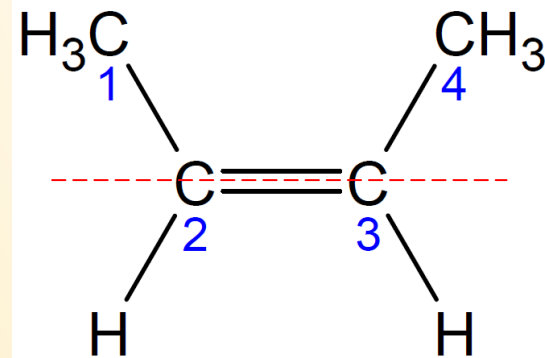


# A geometriai izoméria

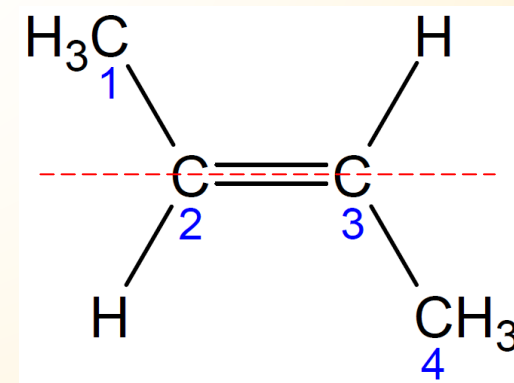
- ▶ a sztereoizoméria egyik formája
- ▶ a kettős kötés vagy a gyűrű merevvé teszi a szerkezetet
- ▶ főként a fizikai tulajdonságokban, ritkán a kémiai jellemzőkben van különbség

# A geometriai izoméria

- ▶ *cisz*-izomer: a nagy méretű csoportok (ligandumok) egymáshoz közel vannak
- ▶ *transz*-izomer: a nagy méretű csoportok (ligandumok) egymástól távol vannak
- ▶ energetikailag a *transz*-izomerek a stabilisabbak
- ▶ a nagy méretű csoportok nem feltétlenül kell azonosak legyenek



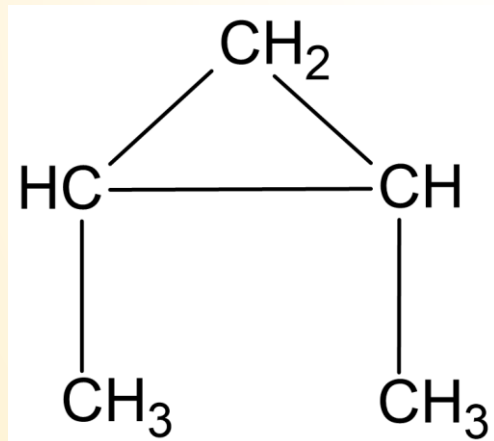
*cisz*-but-2-én



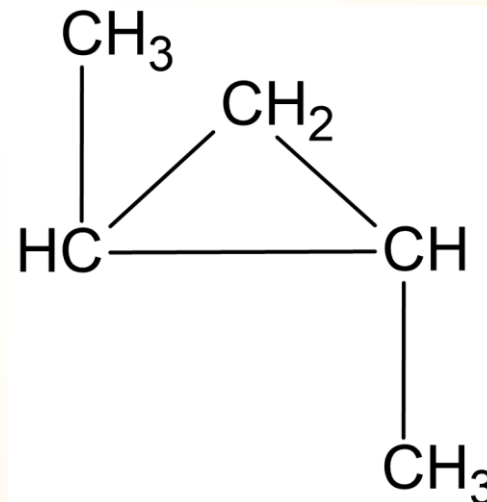
*transz*-but-2-én

# A geometriai izoméria

- ▶ a dimetilcikloalkánok geometriai izomériája
  - ▶ a kevés (3-7) szénatomból álló gyűrűk (viszonylag) merevek, ezért kialakulhatnak a *cisz*- és a *transz*-izomerek



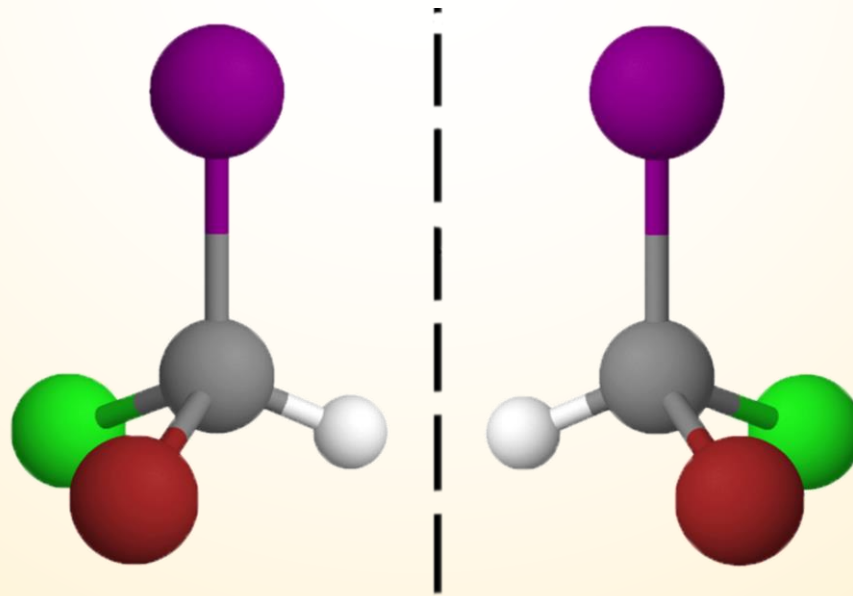
*cisz*-1,2-dimetilciklopropán



*transz*-1,2-dimetilciklopropán

# Az optikai izoméria

- ▶ királis molekula: van olyan tükörképi párja (enantiomer párja), ami nem azonos vele
- ▶ királis szénatom (kiralitáscentrum): olyan szénatom, amelyhez négy különböző ligandum kapcsolódik egyszeres kovalens kötéssel



# Az optikai izoméria

- ▶ enantiomer párok:
  - ▶ fizikai és kémiai tulajdonságuk is megegyezik
  - ▶ viszont a síkban polarizált fényt ellentétes irányba forgatják, és eltérő a biológiai hatásuk
- ▶  $n$  darab kiralitáscentrum esetén  $2^n$  darab a lehetséges konfigurációk száma
  - ▶ szimmetrikus molekulák esetén kevesebb konfiguráció lehetséges
- ▶ diasztereomerek: olyan molekulák, amelyek nem enantiomer párok (mert nem tükörképei egymásnak), de nem is azonosak (ugyanis fedésbe sem hozhatók)
  - ▶ szerkezetükben az egyik kiralitáscentrum körül azonos, a másik körül eltérő elrendezésűek a ligandumok
  - ▶ fizikai tulajdonságaik is eltérők lehetnek

# Felhasznált források

- ▶ OH-KEM910TB/II. tankönyv: *49. Az izoméria* (Oktatási Hivatal, 2021, 50-51. oldal)