

## Capítulo 18 Estructura e isomería de compuestos orgánicos

En este tema se revisan los siguientes aspectos de química orgánica: Enlaces del carbono; estructura e isomería de las moléculas orgánicas. Se aplicarán los conceptos de estructura molecular estudiados, básicamente, en el tema 7 a las moléculas orgánicas. Se estudiará la estructura de Lewis, la geometría y la resonancia en los principales compuestos orgánicos. También se estudiarán los diferentes tipos de isomería en los compuestos orgánicos.

### 18.1 Estructura.

**Ejercicio 18.1.** Indica qué hibridación poseen los átomos de carbono en el ciclohexano.

**Ejercicio 18.2.** Relaciona las siguientes fórmulas moleculares con el tipo de hibridación que presentan los átomos de carbono:

- |                                     |                    |
|-------------------------------------|--------------------|
| 1. CH <sub>4</sub>                  | a. sp              |
| 2. CH <sub>2</sub> =CH <sub>2</sub> | b. sp <sup>2</sup> |
| 3. CH≡CH                            | c. sp <sup>3</sup> |
| 4. CH <sub>3</sub> -CH <sub>3</sub> |                    |

**Ejercicio 18.3.** ¿Cuál es la hibridación del átomo de carbono, así como la geometría, en la molécula de formaldehído, o metanal, HCHO?

**Ejercicio 18.4.** Escribe la estructura de Lewis del ácido fórmico, o ácido metanoico, indicando su geometría.

**Ejercicio 18.5.** Escribe las estructuras de Lewis: a) del fenol b) de la anilina.

**Ejercicio 18.6.** Escribe las estructuras resonantes del 1,3-butadieno, y comenta cuál será el orden de enlace carbono-carbono en la molécula.

**Ejercicio 18.7.** Indica si es Cierto o Falso: Los hidrocarburos cíclicos pequeños, con 3 o 4 átomos de carbono, presentan una tensión de anillo muy grande.

**Ejercicio 18.8.** Indica si es Cierto o Falso: Las moléculas orgánicas con un grupo funcional son polares.

**Ejercicio 18.9.** a) Explica por qué la estructura del benceno es más estable que una estructura equivalente con los 3 dobles enlaces aislados. b) Calcula la energía de estabilización del benceno a partir de los siguientes datos: Hidrogenación del benceno,  $\Delta H = -49.8$  kcal/mol; hidrogenación del ciclohexeno,  $\Delta H = -28.8$  kcal/mol.

## 18.2 Isomería.

**Ejercicio 18.10.** Relaciona cada tipo específico de isomería con su grupo más general:

- |                        |                         |
|------------------------|-------------------------|
| 1. Isomería de cadena  |                         |
| 2. Isomería geométrica | a. Estereoisomería      |
| 3. Isomería de función | b. Isomería estructural |
| 4. Isomería óptica     |                         |

**Ejercicio 18.11.** De los siguientes compuestos, ¿cuál presenta isomería estructural de cadena con el n-octano?

- |               |                          |
|---------------|--------------------------|
| a. Isopentano | b. 2,2,4-trimetilpentano |
| c. 2-octeno   | d. 3-metilhexano         |

**Ejercicio 18.12.** De los siguientes compuestos, ¿cuál presenta isomería estructural de función con el 1-butanol?

- |                |                    |
|----------------|--------------------|
| a. 2-butanol   | b. Ácido butanoico |
| c. Dietil éter | d. Butanal         |

**Ejercicio 18.13.** De las siguientes sustancias, indica cuál presenta isomería geométrica:

- |                     |                     |
|---------------------|---------------------|
| a. 1,1-dicloroetano | b. 1,2-dicloroetano |
| c. 1,1-dicloroeteno | d. 1,2-dicloroeteno |

**Ejercicio 18.14.** De las siguientes sustancias, ¿cuál presenta un carbono asimétrico?

- a. Butano
- b. 2-cloropropano
- c. Etanol
- d. 2-clorobutano

**Ejercicio 18.15.** Indica si es Cierto o Falso: El 2-butanol presenta un carbono asimétrico, por tanto presenta dos estereoisómeros ópticos que son enantiómeros entre sí.

**Ejercicio 18.16.** Relaciona las siguientes sustancias con el número de carbonos asimétricos que presentan:

- |                                   |      |
|-----------------------------------|------|
| 1. Ácido 2-aminopropanoico        | a. 0 |
| 2. 1,2-diclorociclobutano         | b. 1 |
| 3. Ciclohexano                    | c. 2 |
| 4. Ácido 2,3-dihidroxiutanodioico | d. 3 |

**Ejercicio 18.17.** Indica cuál de los siguientes compuestos presenta diastereoisómeros:

- a. Etanol
- b. 1-cloropropano
- c. 2-butanol
- d. 2,3-dibromopentano

**Ejercicio 18.18.** Relaciona cada una de las siguientes sustancias con el número total de estereoisómeros que presenta:

- |  |      |
|--|------|
| 1. $\text{CH}_3\text{-CHClOH}$         | a. 8 |
| 2. $\text{CH}_3\text{-CHCl-CHBr-CH}_3$ | b. 1 |
| 3. $\text{CH}_3\text{-CHCl-CH}_3$      | c. 2 |
| 4. $\text{CH}_3\text{-CH=CH-CH}_3$     | d. 4 |

**Ejercicio 18.19.** Indica si es Cierto o Falso: El 2,3-dihidroxiutano presenta una configuración o forma *meso* (la cuál no es ópticamente activa).

**Ejercicio 18.20.** Indica si es Cierto o Falso: Los diastereómeros son isómeros ópticos que no son enantiómeros.

**Ejercicio 18.21.** Indica si es Cierto o Falso: Los compuestos cíclicos nunca pueden presentar isomería óptica.

**Ejercicio 18.22.** Dibuja las estructuras de los isómeros geométricos del 2-penteno, indicando cuál es cuál.

**Ejercicio 18.23.** Dibuja las proyecciones de Fischer de los enantiómeros del 2-clorobutano, indicando cuál es la R y cuál la S.

**Ejercicio 18.24.** Dibuja los isómeros geométricos del 1,2-dibromociclobutano. Indica también si existe, o no, isomería óptica; en caso afirmativo indicar los carbonos asimétricos y el número total de estereoisómeros.

**Ejercicio 18.25.** Indica si es Cierto o Falso: Una conformación es una cierta disposición espacial de los átomos de una molécula, la cual puede transformarse en otra conformación sólo por ruptura de alguno de los enlaces.

### 18.3. Respuestas a los ejercicios.

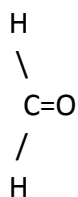
18.1.  $sp^3$

Además, el ciclohexano es un ciclo que no presenta tensión y los ángulos se acercan al tetraedro, típico de la hibridación  $sp^3$ .

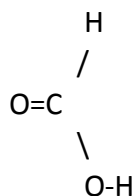
18.2. 1 → c, 2 → b, 3 → a, 4 → c.

La hibridación  $sp^3$  se presenta en los átomos de carbono que forman 4 enlaces simples y presentan geometría tetraédrica; la hibridación  $sp^2$  se da en los átomos de carbono que forman un enlace doble y presentan una geometría plana trigonal, mientras que la hibridación  $sp$  se da en átomos de carbono cuando forman un enlace triple y presentan geometría lineal.

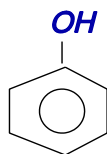
18.3. Hibridación  $sp^2$ , geometría plana trigonal.



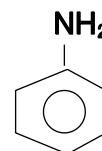
18.4. Geometría plana trigonal.



18.5.



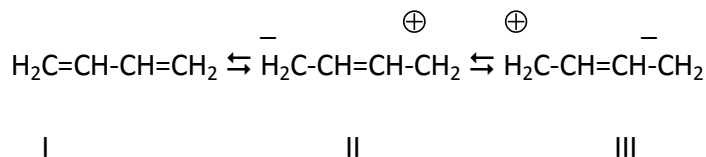
Fenol



Anilina

**18.6.** Orden de enlace entre 1 y 2.

Estructuras resonantes:



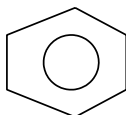
Orden de enlace: Puesto que en las estructuras resonantes aparece, o bien un enlace simple o bien un enlace doble entre los átomos de carbono, el orden de enlace estará entre los valores 1 (enlace simple) y 2 (enlace doble).

**18.7.** Cierto.

**18.8.** Cierto.

Los grupos funcionales introducen heteroátomos, átomos diferentes del C e H, en la cadena hidrocarbonada. El enlace carbono-heteroátomo es, generalmente, polar y, por tanto, la molécula presenta un momento dipolar.

**18.9.** a) El benceno presenta 3 dobles enlaces conjugados en un anillo de 6 carbonos. Puesto que existe la posibilidad de formular dos estructuras resonantes equivalentes, la molécula de benceno, que es un híbrido de resonancia, tiene más estabilidad que si sólo se considerara una de las estructuras. Debido a esta resonancia, los electrones *pi* del benceno se hallan deslocalizados por todo el anillo.



b) La energía de estabilización se puede estimar a partir de la entalpía de hidrogenación del benceno,  $\text{C}_6\text{H}_6 + 3 \text{H}_2 = \text{C}_6\text{H}_{12}$   $\Delta\text{H}=-49.8$  kcal/mol, y de la entalpía de hidrogenación del ciclohexeno,  $\text{C}_6\text{H}_{10} + \text{H}_2 = \text{C}_6\text{H}_{12}$   $\Delta\text{H}=-28.8$  kcal/mol. Se puede considerar al doble enlace del ciclohexeno como un doble enlace aislado y calcular la entalpía de hidrogenación de 3 dobles enlaces aislados:  $3 \times (-28.8) = -86.4$  kcal. Ésta

sería la entalpía de hidrogenación del benceno si no existiera resonancia, por tanto, restándole a este valor el valor real de la entalpía de hidrogenación del benceno, tendremos la entalpía o energía de estabilización del benceno:  $-86.4 - (-49.8) = -36.6$  kcal/mol.

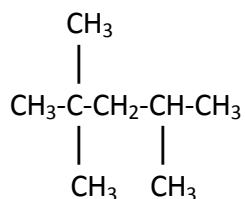
**18.10.** 1 → b, 2 → a, 3 → b, 4 → a.

**18.11.** b.

El 2,2,4-trimetilpentano es también un octano de fórmula molecular  $C_8H_{18}$ . La diferencia respecto al n-octano, u octano de cadena lineal, está justamente en la cadena hidrocarbonada puesto que en el 2,2,4-trimetilpentano la cadena es ramificada.

n-octano:  $CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-CH_3$

2,2,4-trimetilpentano:



**18.12.** c.

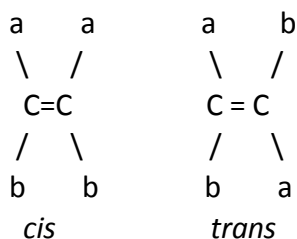
Solo el dietil éter tiene la misma fórmula molecular,  $C_4H_{10}O$ , pero con una función o grupo funcional distinto. Las respectivas estructuras son:

1-butanol:  $CH_3-CH_2-CH_2-CH_2OH$

Dietil éter:  $CH_3-CH_2-O-CH_2-CH_3$

**18.13.** d.

Pueden presentar isomería geométrica los alquenos y los cicloalcanos. En los alquenos, los grupos unidos a cada átomo de carbono del doble enlace tienen que ser diferentes. Ejemplo  $abC=Cab$ :



En los cicloalcanos tiene que haber también dos átomos de carbono unidos a átomos o grupos diferentes.

**18.14.** d.

Un carbono asimétrico debe estar unido a cuatro grupos diferentes. Ejemplo: Cabcd. Estudiando las estructuras de los compuestos dados, sólo el 2-clorobutano presenta un carbono asimétrico, en la posición 2:  $\text{CH}_3\text{-CHCl-CH}_2\text{-CH}_3$ .

**18.15.** Cierto.

**18.16.** 1 → b, 2 → c, 3 → a, 4 → c.

**18.17.** d.

El 2,3-dibromopentano presenta dos carbonos asimétricos y 4 estereoisómeros. Entre estos estereoisómeros existen relaciones de enantiomería y de diastereomería (o diastereoisomería). Los 4 estereoisómeros son enantiómeros dos a dos, es decir, pueden agruparse en dos grupos de enantiómeros. Un enantiómero de un grupo con un enantiómero del otro grupo no son enantiómeros entre sí, por lo que se les llama diastereómeros o diastereoisómeros.

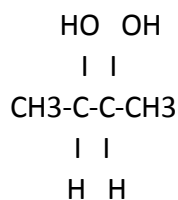
**18.18.** 1 → c, 2 → d, 3 → b, 4 → c.

El número 1 presenta un carbono asimétrico y, por tanto, dos isómeros ópticos; el carbono 2 presenta dos carbonos asimétricos y cuatro isómeros ópticos; el número 3 no presenta ningún carbono asimétrico, por lo que solo tiene una configuración posible; el número 4 presenta dos isómeros geométricos.



**18.19.** Cierto.

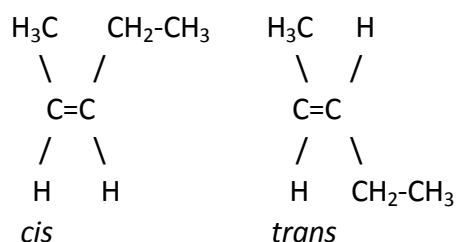
Si una configuración presenta plano de simetría, entonces es una forma *meso* y no presenta actividad óptica.

**18.20.** Cierto.

Los isómeros ópticos presentan una relación de enantiomería o bien de diastereomería entre si.

**18.21.** Falso.

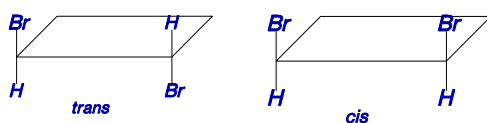
Los compuestos cíclicos pueden presentar, al igual que los acíclicos, carbonos asimétricos y, por tanto, isomería óptica; la diferencia es que en los ciclos hay como mínimo dos carbonos asimétricos y nunca uno solo. Ejemplo: El 1,2-diclorociclobutano presenta dos isómeros geométricos, el *cis* y el *trans*; a su vez presenta dos carbonos asimétricos, el 1 y el 2. El isómero *cis* tiene plano de simetría, por lo que constituye una forma *meso* que no tiene actividad óptica, mientras que el isómero *trans* existe en dos enantiómeros.

**18.22.**

18.23.



18.24. Sí que existe isomería óptica. Hay 2 carbonos asimétricos y 3 estereoisómeros puesto que el isómero *cis* es una forma *meso*, mientras que el isómero *trans* presenta dos enantiómeros.



18.25. Falso.

Las conformaciones de una molécula se producen por rotación a través de los enlaces simples y no implican ninguna ruptura de enlaces.