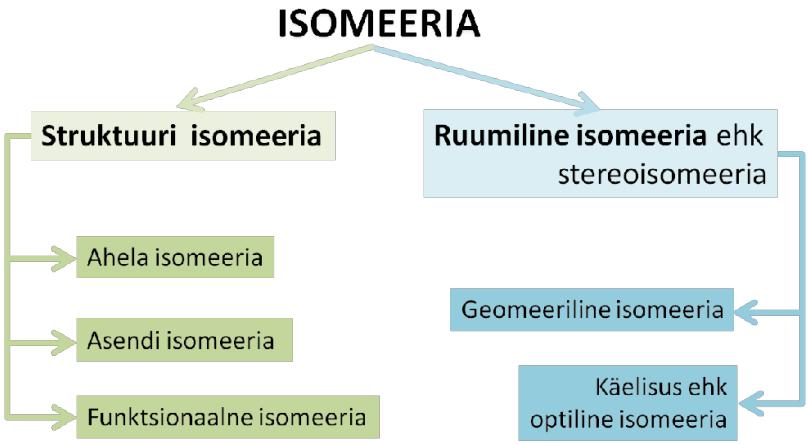
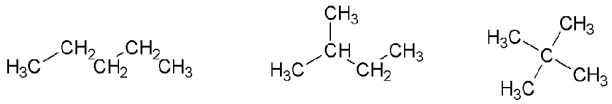
Isomeeria ja ainete füüsikalised omadused

Süsiniku aatomite võime esineda erinevates valentsolekutes, moodustada hargnemata ja hargnenud ahelaid ning siduda teiste elementide aatomeid sisaldavaid funktsionaalseid rühmi, tekitab võimaluse, et sama summaarse valemiga kirjeldatav molekul võib omada mitmeid erinevaid struktuure. See nähtus on orgaaniliste ühendite **isomeeria**. Isomeeria liike on mitu ning neid võib kirjeldada järgmise skeemi abil:



Struktuuri isomeere iseloomustab molekulide sama koostis ja summaarne valem, erinevused on aga ilmsed kui võrrelda struktuurivalemeid. Struktuuri isomeeria mõjutab ühendite füüsikalisi ja keemilisi omadusi. Seda on näha järgnevatest näidetest.

Ahela isomeerid. Näiteks kirjeldab summaarne valem C_5H_{12} pentaani, 2-metüülbutaani, 2,2-dimetüülpropaani, mille struktuurivalemid



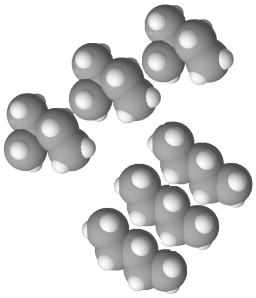
ja ruumiline struktuur on erinevad. Kõik need ühendid omavad erinevat keemistemperatuuri ja tihedust. Keemistemperatuuri vähenemine toimub koos ahela hargnemisega, mis vähendab molekulide kokkupuute pinda takistab nende vastastikmõjusid.

	pentaan	2-metüülbutaan	2,2-dimetüülpropaan
Keemistemperatuur, ^oC	36,0	27,7	9,5

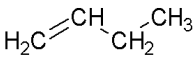
Tihedus, g/cm^3	0,621	0,616	0,586

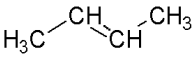
Seda olukorda illustreerib ka järgnev joonis, mis võrdleb

hargnenud ahelaga molekulide (ülemine rida) ja mittehargnenud ahelaga molekulide (alumine rida) omavahelist paiknemist.

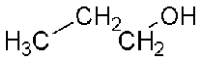


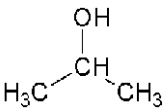
Asendi isomeerid. Ühendid, mille summaarne valem on C_4H_8 on alkeenid, mille kaksikside on erinevates asendites





Ühendid, mille summaarne valem on C_3H_8O, on aga alkoholid, kus hüdroksüülrühm on süsinikahelas erinevates kohtades. Seda iseloomustavad struktuurivalemid





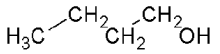
ja samuti nende molekulide mudelid. Selline struktuuri muutus tekitab asendi isomeere, mille füüsikalised omadused on erinevad.

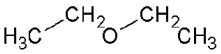
	but-1-een	but-2-een	propaan-1-ool	propaan-2-ool
Keemistemperatuur, ^{o}C	-6,5	3,7 (*cis*) 0.9 (*trans*)	97,5	82,6

Tihedus, g/cm^3	0,62	0,641 (*cis*) 0,626 (*trans*)	0,803	0,786

Füüsikaliste omaduste erinevuse põhjused on samad, mis ilmnesid ahela isomeeride korral. Ka siin on molekulide vastastikmõjud seda tugevamad, mida tihedamalt ahelad on kokku pakitud.

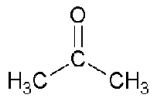
Funktsionaalsed isomeerid. Sama summaarne valem $C_4H_{10}O$ kirjeldab alkoholi (näitena on toodud butaan-1-ool) ja eetrit (dietüüleeter). Nende molekulide struktuurivalemid on erinevad

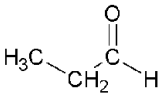




ja samuti erinevad nende molekulide struktuurid.

Summaarne valem C_3H_6O kirjeldab aga ketooni ja aldehüüdi



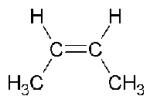


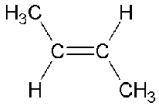
Ka nende isomeeride füüsikalised omadused olenevad oluliselt molekuli struktuurist, kusjuures siin kajastuvad ka aineklasside vahelised erinevused. Need seisnevad eelkõige võimaluses moodustada vesiniksidemeid, mida illustreerib alkoholi ja eetri omaduste suur erinevus.

	butaan-1-ool	dietüüleeter	propanoon	propanaal
Keemistemperatuur, ^{o}C	117,7	34,6	56,5	48
Tihedus, g/cm^3	0,81	0,713	0,791	0,866

Stereoisomeeride **ehk ruumiliste isomeeride** korral on lisaks summaarsele valemile sarnased ka lihtsustatud struktuurivalemid, sest neis molekulides on aatomite ja sidemete paiknemise järjekord sama. Isomeeride olemasolu avaldub ruumiliste struktuurivalemite ning loomulikult ruumiliste molekulimudelite kaudu. Arvestades teatud kokkuleppelisi tähistusi saab neid isomeere kujutada ka tasapinnalistel joonistel. Neid isomeeria vorme iseloomustavad järgmised näited.

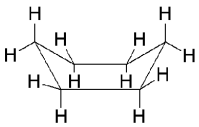
Geomeetriliste isomeeride näiteks on but-2-eeni *cis*- ja *trans*- isomeerid (ehk *Z*- ja *E*- isomeerid), mida kirjeldab samasugune lihtsustatud struktuurivalem CH_3-CH=CH-CH_3, kuid struktuuride erinevusi näitavad juba struktuurivalemid

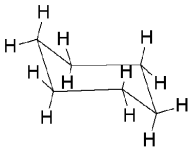




ja loomulikult ka molekulide mudelid. Nende *cis*- ja *trans*- isomeeride keemistemperatuurid ja tihedused on mõnevõrra erinevad ja need andmed on toodud ülalpool.

Samuti esinevad geomeetrilised isomeerid tsükliliste molekulide korral. Näitena on toodud tsükloheksaani nn ?vanni? ja ?tugitooli? kujutavad struktuurid, mille kohta kasutatakse ka nimetust "konformatsioonid".





On oluline , et geomeetriline isomeeria on võimalik siis, kui molekuli mingi osa on ?jäik? , st esineb pöörlemist mitte lubav kaksikside või tsükkel.

Molekulide ?käelisus? kui ruumilise isomeeria vorm esineb siis, kui molekuli ei saa pööramise teel kokku sobitada tema peegelpildiga. Analoogiline olukord iseloomustab vasakut ja paremat kätt, sest vaatamata käte sarnasusele ei saa neid paigutada nii, et nad oleksid täpselt samas asendis.



Seetõttu on ka parema ja vasaku käe kindad erinevad ning neid ei saa omavahel vahetada. Sellest analoogiast lähtudes kasutatakse ka molekulide korral ?käelisuse? mõistet ning on võimalik määrata reeglid, mille puhul süsiniku aatomiga seotud asendusrühmad ?käelisust? põhjustavad ehk millised aatomid molekulis on **kiraalsed**. Termin ?kiraalne? tuleneb kreekakeelsest sõnast *ceir* ? käsi ning seda kasutatakse molekuli kui ka selles olevate aatomite kirjeldamiseks.

Molekulide ?käelisusega? kaasneb see, et need ühendid pööravad erinevalt neid läbiva polariseeritud valguskiire tasapinda, kallutades seda kas paremale (kellaosuti liikumise suunas, kui vaadata valgusallika poole) või vasakule (vaadates jälle valgusallika suunas). Lähtudes ladinakeelsetest sõnadest *dextra* parem ja *laevus* vasem asuti neid valgust pööravaid isomeere tähistama kui *D*- ja *L*- isomeere. Seejuures nimetatakse neid isomeere ka optilisteks isomeerideks ehk **enantiomeerideks**. Nii on näiteks kodeeritavad aminohapped *L*-isomeerid ja looduslikud suhkrud *D*-isomeerid. Kui tegemist on enantiomeeride (st optiliste isomeeride) seguga, kus polariseeritud valguskiire tasapinda paremale ja vasakule pööravate molekulide arv on võrdne, polarisatsiooni pööramist katses ei täheldata. Sellist segu, mis koosneb võrdsest hulgast *L* ja *D* isomeeridest, nimetatakse **ratsemaadiks**. Tänapäeval kasutatakse kiraalsete molekulide optilise aktiivsuse kirjeldamiseks mitmeid erinevaid ja molekuli struktuuri täpsemalt iseloomustavaid tähistusi.

Õppematerjalid on valminud Eesti Teadusagentuuri programm TeaMe raames ning rahastatud Euroopa Sotsiaalfondist. TeaMe on teadust ja tehnoloogiat populariseeriv programm, mille üheks eesmärgiks on uute loodus-, täppis- ja tehnikateaduste valdkonna õppematerjalide väljatöötamine üldhariduskoolile. Lisainfo: www.etag.ee/teame

Eesti Teadusagentuur
Estonian Research Council
TeaMe
Euroopa Liit
Euroopa Sotsiaalfond
Eesti tuleviku heaks
CC BY SA