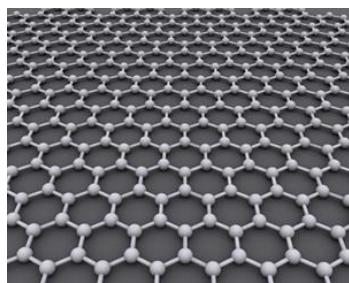
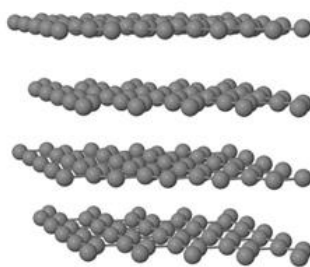


# Hiilen allotropia

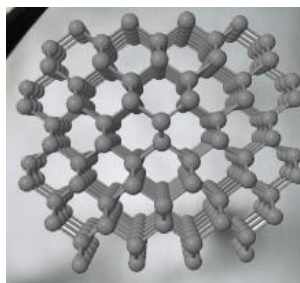
- Allotropia on alkuaineiden kyky esiintyä samassa paineessa ja lämpötilassa erilaisissa kemiallisissa muodoissa. Allotropia on seurausta saman alkuaineen atomien erilaisesta sitoutumisesta ja niiden muodostamasta kiderakenteesta. Tunnetuin esimerkki allotropiasta on kiinteän hiilen esiintyminen grafeeninä, grafiittina, timanttina, fullereenina ja nanoputki.



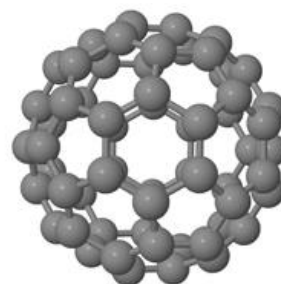
Grafeeni



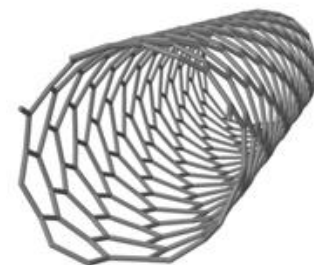
Grafiitti



Timantti



Fullereeni



Nanoputki

# Isomeria



# Empiirinen kaava, molekyylikaava, rakennekaava, viivakaava

- **Empiirinen kaava** (suhdekaava) ilmoittaa, missä suhteessa yhdiste sisältää eri alkuaineiden atomeja
- **Molekyylikaava** ilmoittaa, monta alkuaineen atomia on yhdisteen molekyylissä
- **Rakennekaava** ilmoittaa molekyylissä olevien atomien keskinäisen sijainnin
  - Tiivistetty rakennekaava, Viivakaava

# Empiirinen, molekyyli- ja rakennekaavat

	empiirinen kaava	molekyylikaava	rakennekaava
etaani	CH <sub>3</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	$  \begin{array}{c}  \text{H} \quad \text{H} \\    \quad   \\  \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\    \quad   \\  \text{H} \quad \text{H}  \end{array}  $
eteeni	CH <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	$  \begin{array}{c}  \text{H} \quad \text{H} \\  \diagdown \quad / \\  \text{C}=\text{C} \\  / \quad \diagdown \\  \text{H} \quad \text{H}  \end{array}  $
etyyni	CH	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	$\text{H}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{H}$
	empiirinen kaava	molekyylikaava	rakennekaava
heksaani	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	$  \begin{array}{cccccc}  \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\    &   &   &   &   &   \\  \text{H}-\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C}-\text{H} \\    &   &   &   &   &   \\  \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H}  \end{array}  $
1-buteeni	CH <sub>2</sub>	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub>	$  \begin{array}{cccc}  \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} \\  \diagdown & / &   &   \\  \text{C} & =\text{C} & -\text{C} & -\text{C}-\text{H} \\  / & &   &   \\  \text{H} & & \text{H} & \text{H}  \end{array}  $
1-oktyyni	C <sub>4</sub> H <sub>7</sub>	C <sub>8</sub> H <sub>14</sub>	$  \begin{array}{cccccccc}  \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & & & \\    &   &   &   &   &   & & & \\  \text{H}-\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & -\text{C} & \equiv\text{C} & -\text{H} \\    &   &   &   &   &   & & & \\  \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & \text{H} & & &   \end{array}  $

# Isomeria

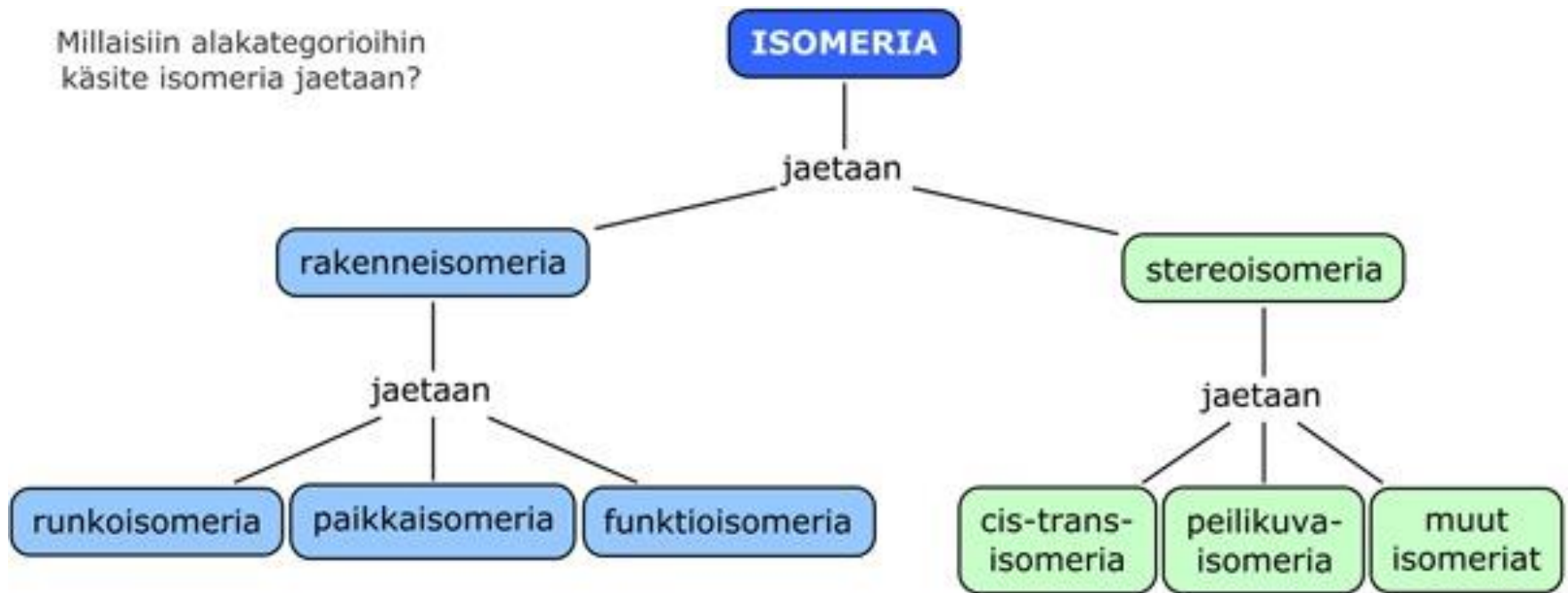
Jos kahdella aineella on eri sidosrakenne mutta sama molekyylikaava, aineita kutsutaan **isomeereiksi**. Isomeerien fysikaaliset ja kemialliset ominaisuudet eroavat toisistaan.

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.

# Isomerian eri muotoja

Millaisiin alakategorioihin  
käsite isomeria jaetaan?

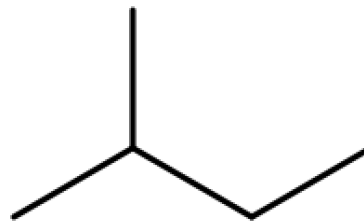


# Runkoisomeria

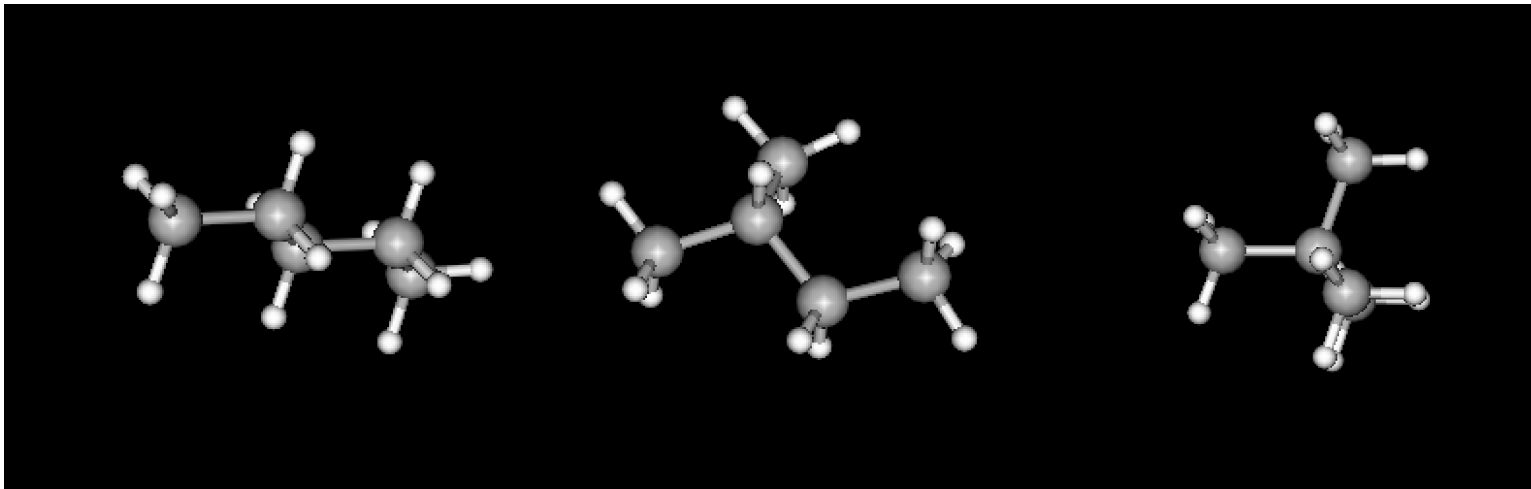
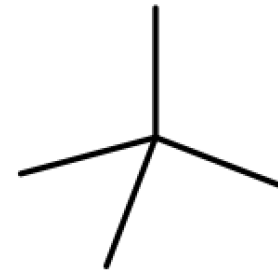
pentaani



2-metyylibutaani



2,2-dimetyylipropaani



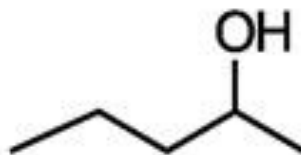
# Paikkaisomeria

1-pentanol



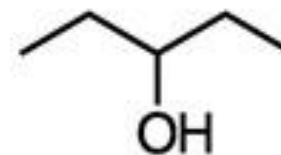
primäärinen  
alkoholi

2-pentanol



sekundäärinen  
alkoholi

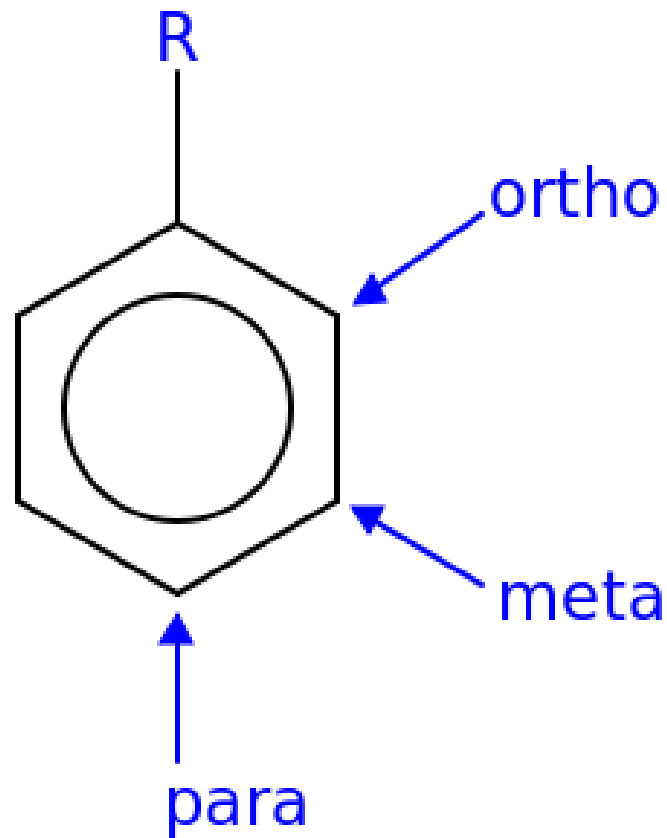
3-pentanol



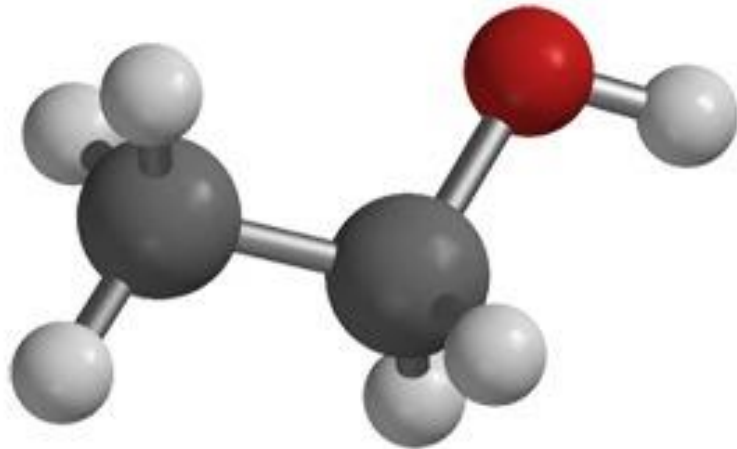
sekundäärinen  
alkoholi



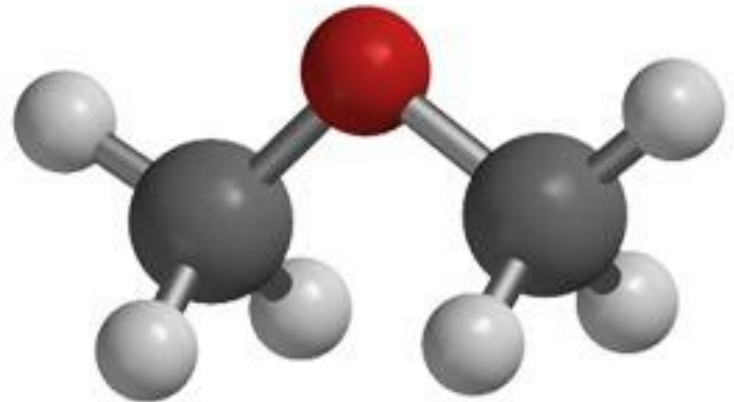
# Bentseenirakenteet – ”Omppu”



# Funktioisomeria



Etanoli,  $C_2H_6O$

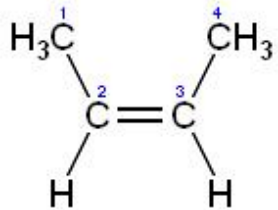


Dimetyylieetteri,  $C_2H_6O$

# Rakenneisomerian vaikutuksia

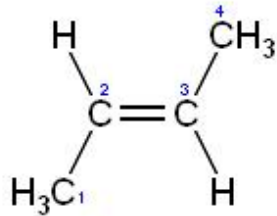
- Runkoisomeria:
  - vaikuttaa kiehumispisteeseen
  - vaikuttaa biohajoavuuteen
- Paikkaisomeria:
  - vaikuttaa kiehumispisteeseen
  - vaikuttaa reaktiivisuuteen
  - aromaattisten yhdisteiden ominaisuuksiin
- Funktionaalinen isomeria:
  - kokonaan eri yhdisteitä → eri kemialliset ominaisuudet

# cis-trans-isomeria



cis-2-buteeni

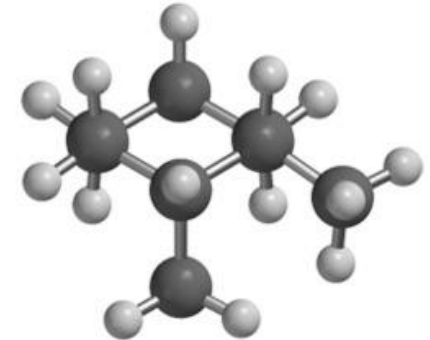
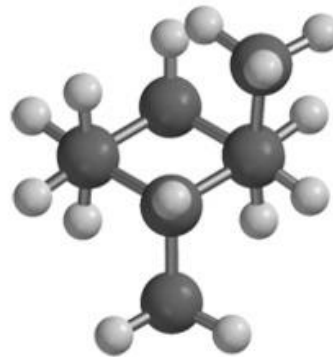
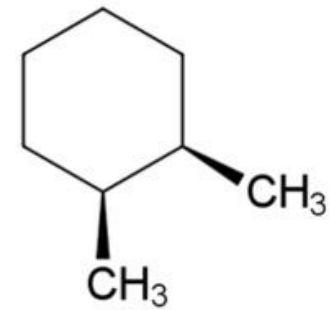
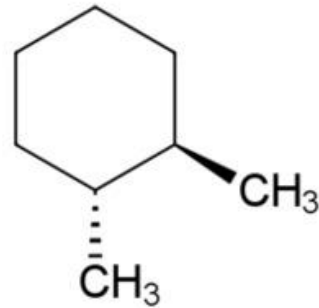
z-2-buteeni



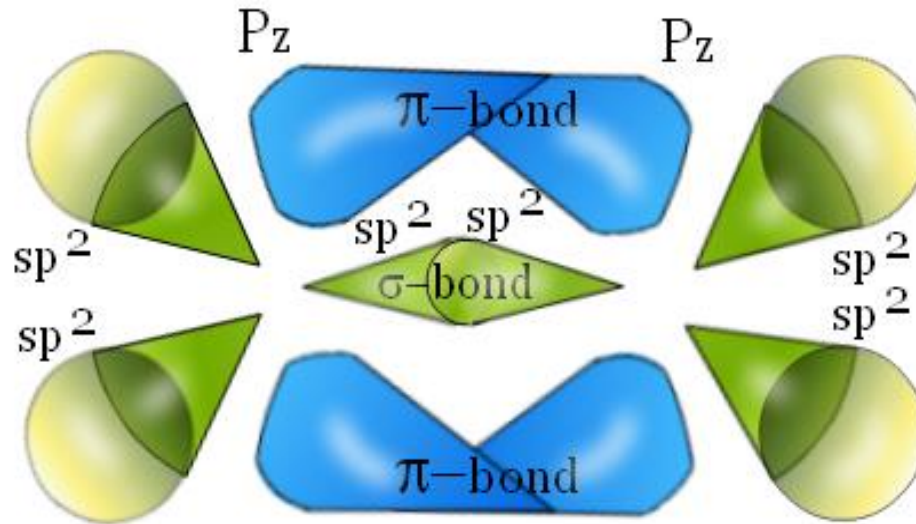
trans-2-buteeni

e-2-buteeni

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

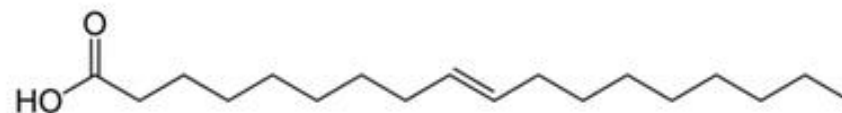
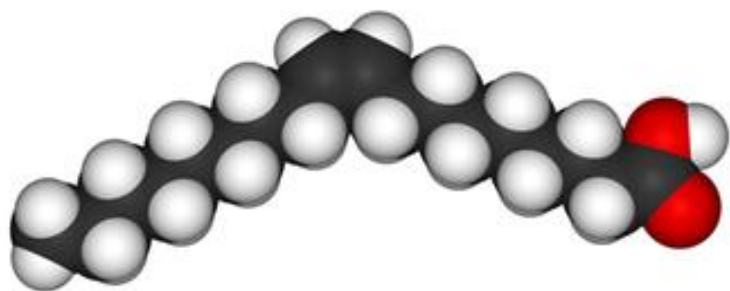
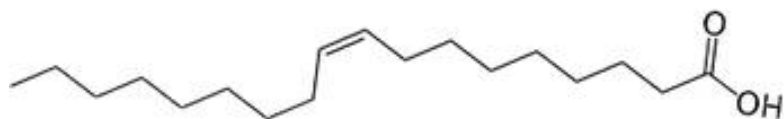


# $\pi$ -sidos



Kaksoissidoksen  $\pi$ -sidosorbitaali muodostuu kohdakkain olevista p-orbitaaleista  
→ ei pysty kiertymään → cis- ja trans-isomeerit eivät voi spontaanisti muuttua toisikseen.

# Rasvahapot

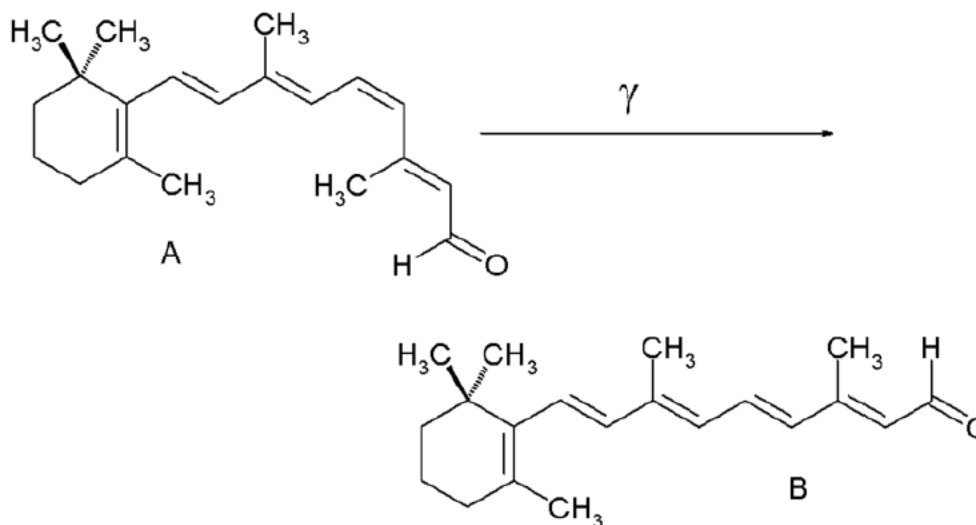


Vasemmalla öljyhappo (cis), oikealla elaidiinihappo (trans)

# Silmän cis-trans-isomeriaa

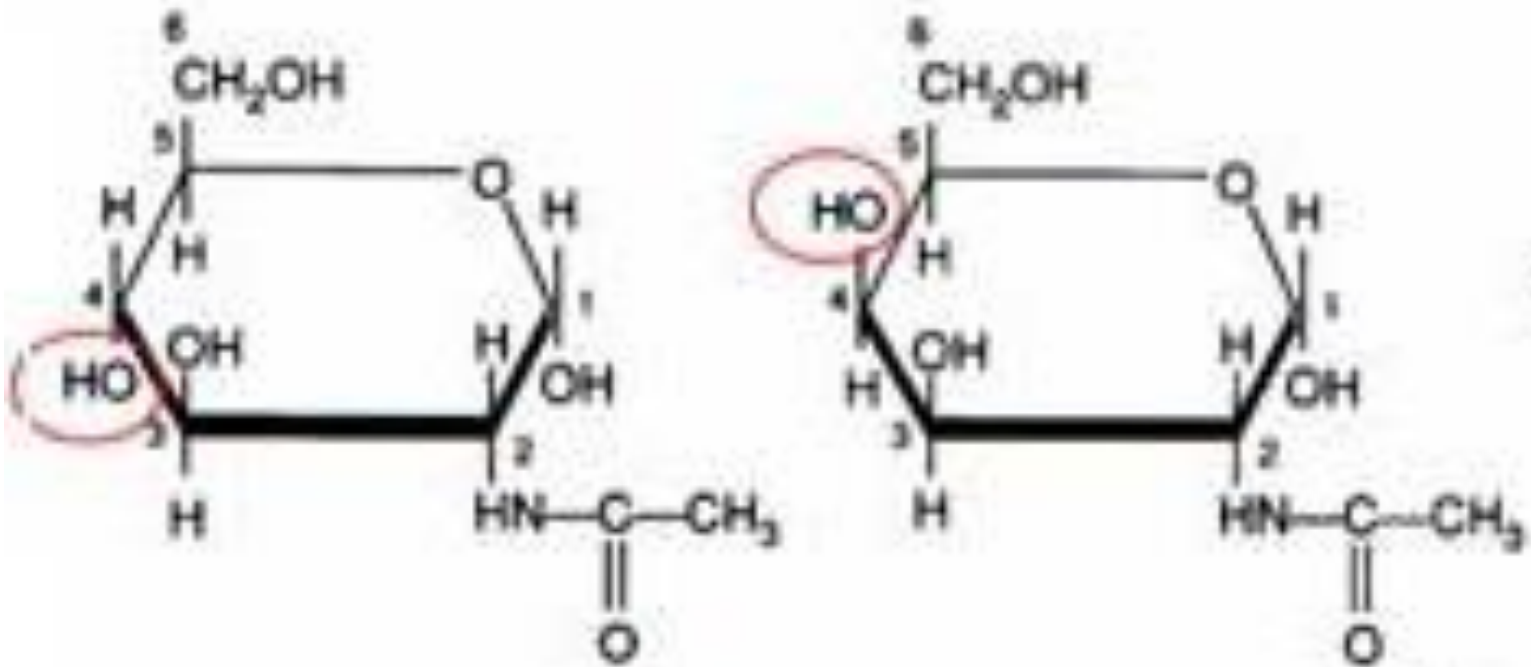
## Silmän aistinsolut

- Täälläkin cis-trans-isomeriaa:



- Entsyymit palauttavat alkuperäiseen muotoon

# Muita stereoisomeerejä



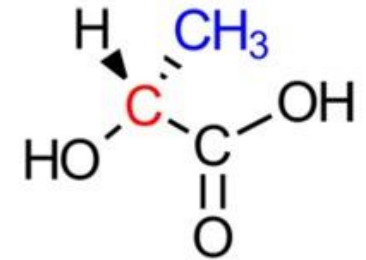
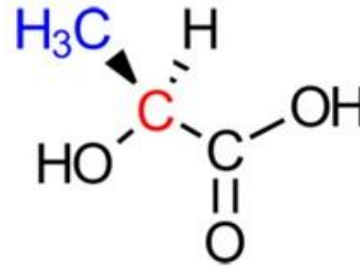
glukoosi

galaktoosi

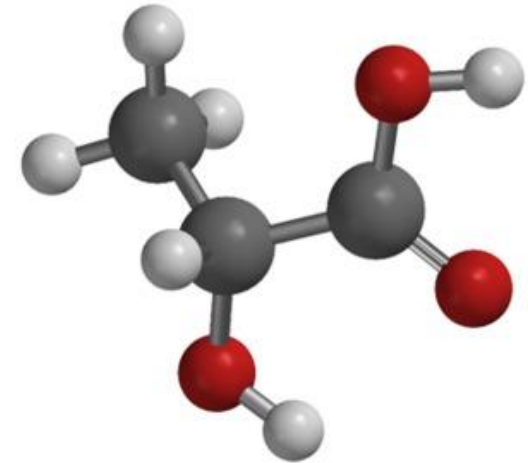
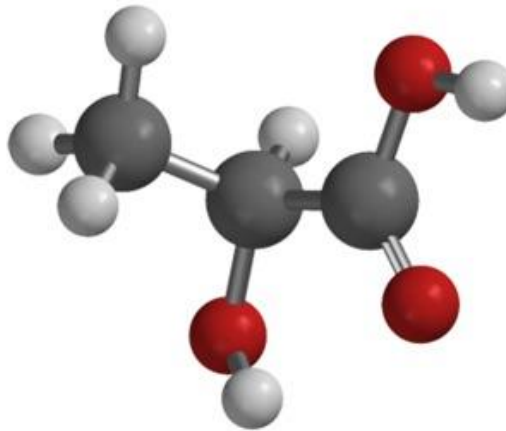


# Peilikuvaisomeria

Hiilyhdisteiden  $sp^3$ -hybridisoituneiden hiiliatomien tetraedrimäinen rakenne mahdollistaa peilikuvaisomerian.

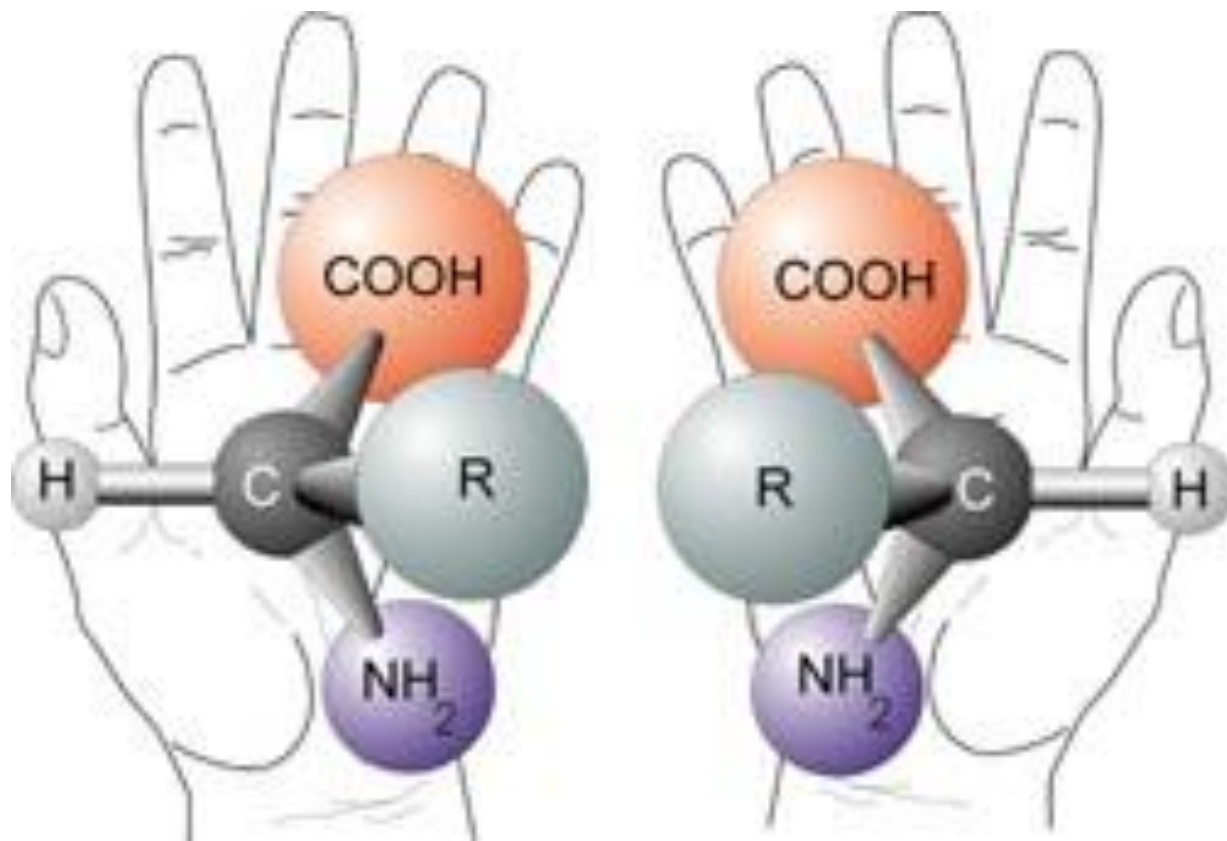


Molekyyleillä on hiiliatomi johon on liittynyt **neljä erilaista** atomia, hiilirunkoa tai toiminnallista ryhmää.



Kyseistä hiiltä sanotaan kiraaliseksi tai asymmetriseksi hiileksi.

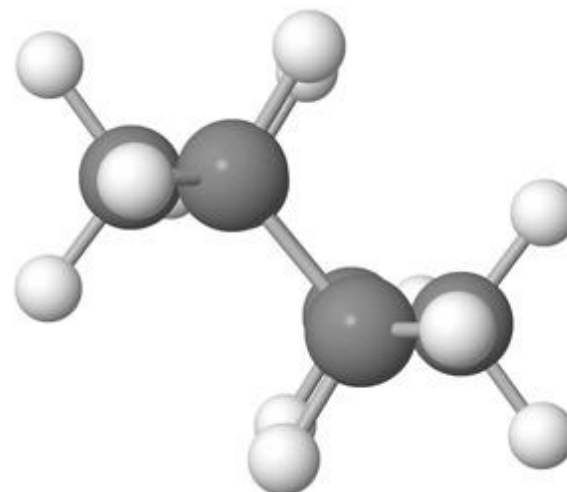
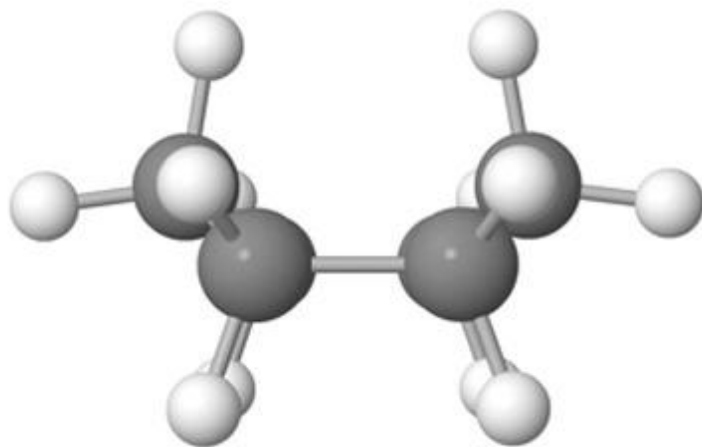
# Kiraalisuus



# Optinen aktiivisuus

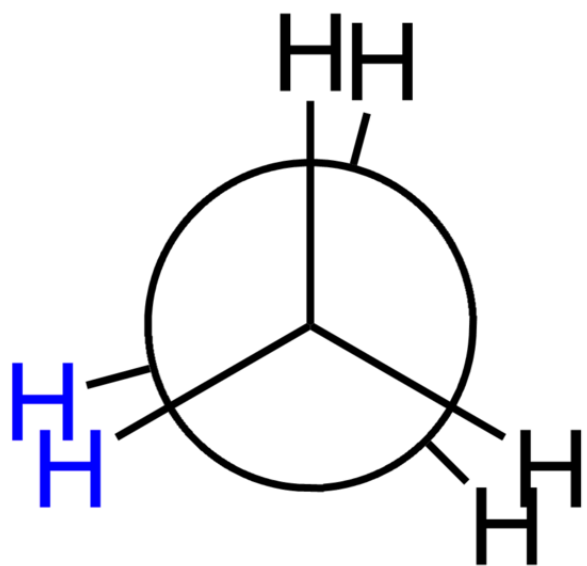
- **Enantiomeereillä** on identtiset fysikaaliset ominaisuudet, kuten sulamispiste ja kiehumispiste, mutta niillä on erilainen optinen aktiivisuus eli ne kiertävät eri suuntiin tasopolaroitua valoa.
- **Raseeminen** seos, jossa on yhtä paljon kumpaakin enantiomeeriä, on ulospäin optisesti inaktiivinen.

# Konformaatioisomeerit

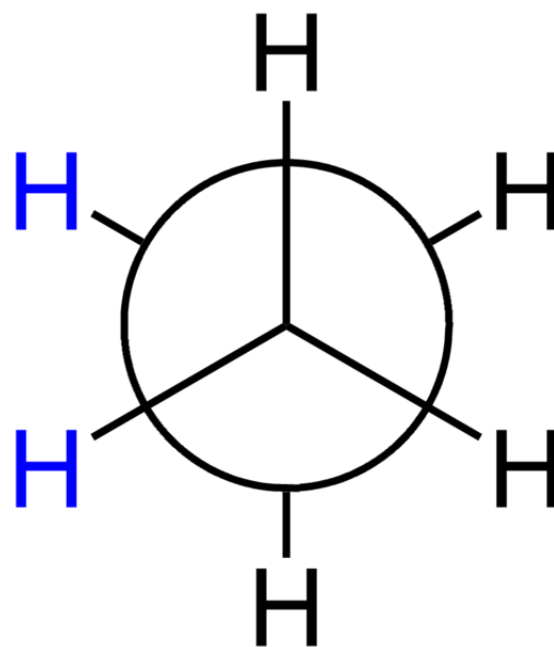


Venemuodossa vetyatomit ovat kohdakkain, kun taas tuolimudossa sykloheksaanin vedyt ovat mahdollisimman kaukana toisistaan

# Etaanin konformaatiot



kohdakkain



lomittain

# Stereoisomerian vaikutuksia

- Cis-trans-isomeria:
  - eri ominaisuuksia; erilainen maku tai tuoksu
  - vaikuttaa rasvahappojen ominaisuuksiin suuresti
- Peilikuvaisomeria:
  - fysikaaliset ominaisuudet samat
  - fysiologiset vaikutukset voivat olla erittäin erilaisia
  - optinen aktiivisuus
  - elävässä solussa muodostuu yleensä vain toista enantiomeeria (esimerkiksi lihaksissa syntyy myötapäivään kiertävää maitohappoa, maitohappobakteerien aiheuttamassa käymisessä taas vastapäivään kiertävää)

# Tehtäviä

- Laadi esim. MarvinSketchillä jokin mahdollinen rakennekaava yhdisteelle
  - $C_4H_9Cl$ , joka on optisesti aktiivinen,
  - $C_3H_5Cl$ , jolla tavataan cis-trans-isomeriaa,
  - $C_6H_{11}Cl$ , joka voi esiintyä tuoli- ja venekonformaatioissa.
- Määritä  $C_3H_6O$  -molekyylin isomeerit.