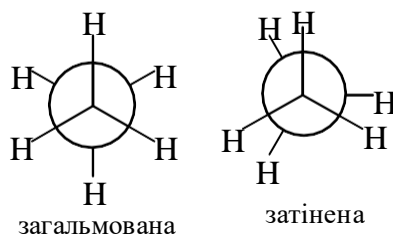
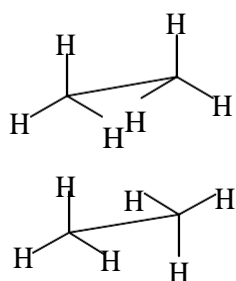


Конформаційні ізомери органічних речовин

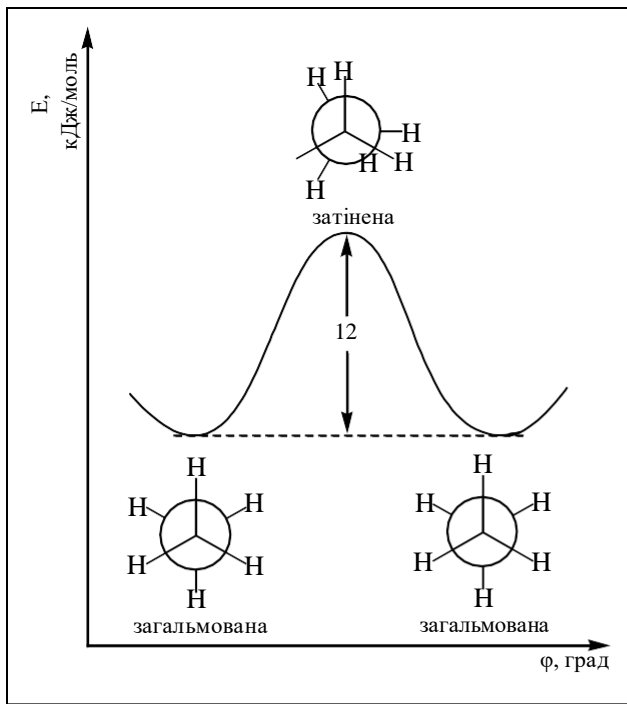
Конформації – певні просторові форми молекул, які виникають при внутрішньому обертанні груп атомів навколо простих зв'язків без їх розщеплення

Перспективні проєкції

Проекції Ньюмена



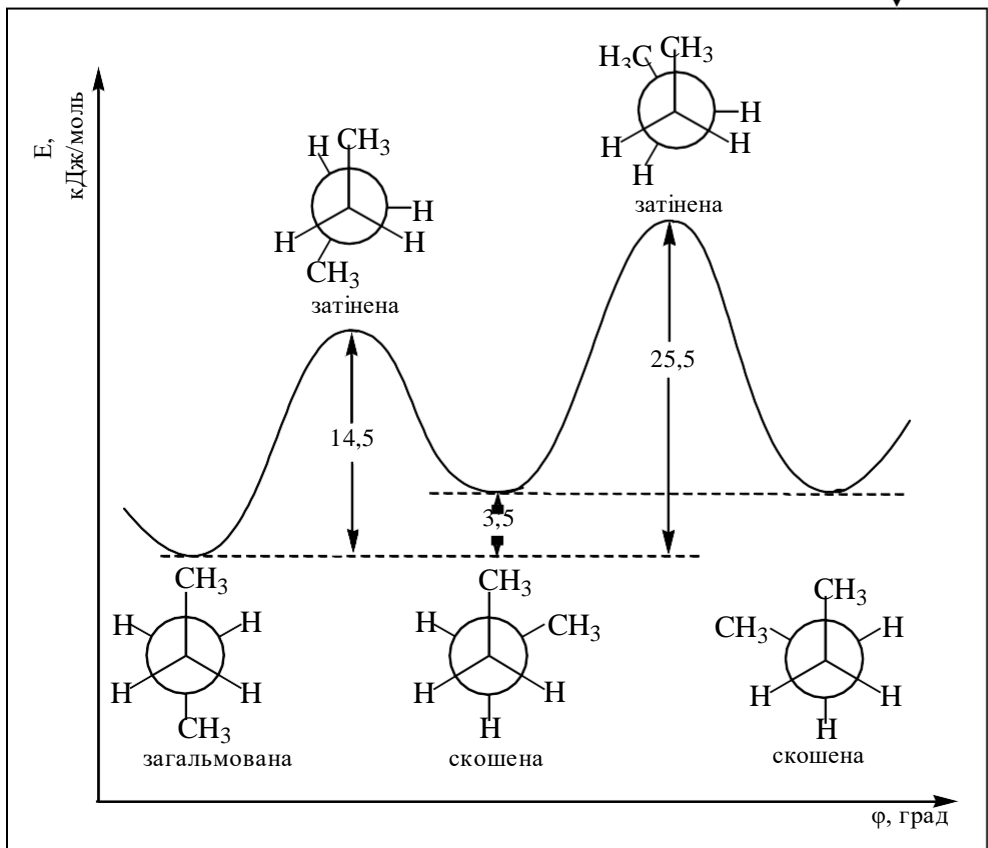
σ -Зв'язок між атомами має циліндричну симетрію відносно лінії, що зв'язує два ядра. Існує вільне обертання навколо одинарного (простого) С–С зв'язку. Однак, обертання навколо одинарного (простого) С–С зв'язку не зовсім вільне: існує енергетичний бар'єр. Конформації мають різну енергію внаслідок стеричних перешкоджань, торсійної напружки, вандерваальсових взаємодій



Конформації етану

Конформаційний аналіз

Конформації бутану

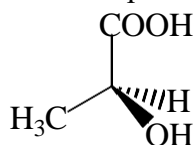


Сtereохімічна конфігурація органічних речовин

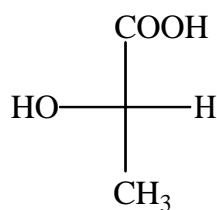
Характеризує просторове розташування атомів чи груп атомів в молекулі сполуки (тетраедрична модель атома карбону) (Вант-Гофф Я., Ле-Бель Ж.)

Клиноподібні формули

Молекулу показують як тетраедричну або тригональну конфігурацію на площині креслення. Зв'язки, розташовані на цій площині, позначають звичайними рисками. Зв'язки, які розташовані над (перед) площиною, позначають зафарбованими клинами. Зв'язки, які знаходяться під (за) площиною – незафарбованими клинами або штриховими клинами протилежного напрямку:



*Проекційні формули
Фішера*



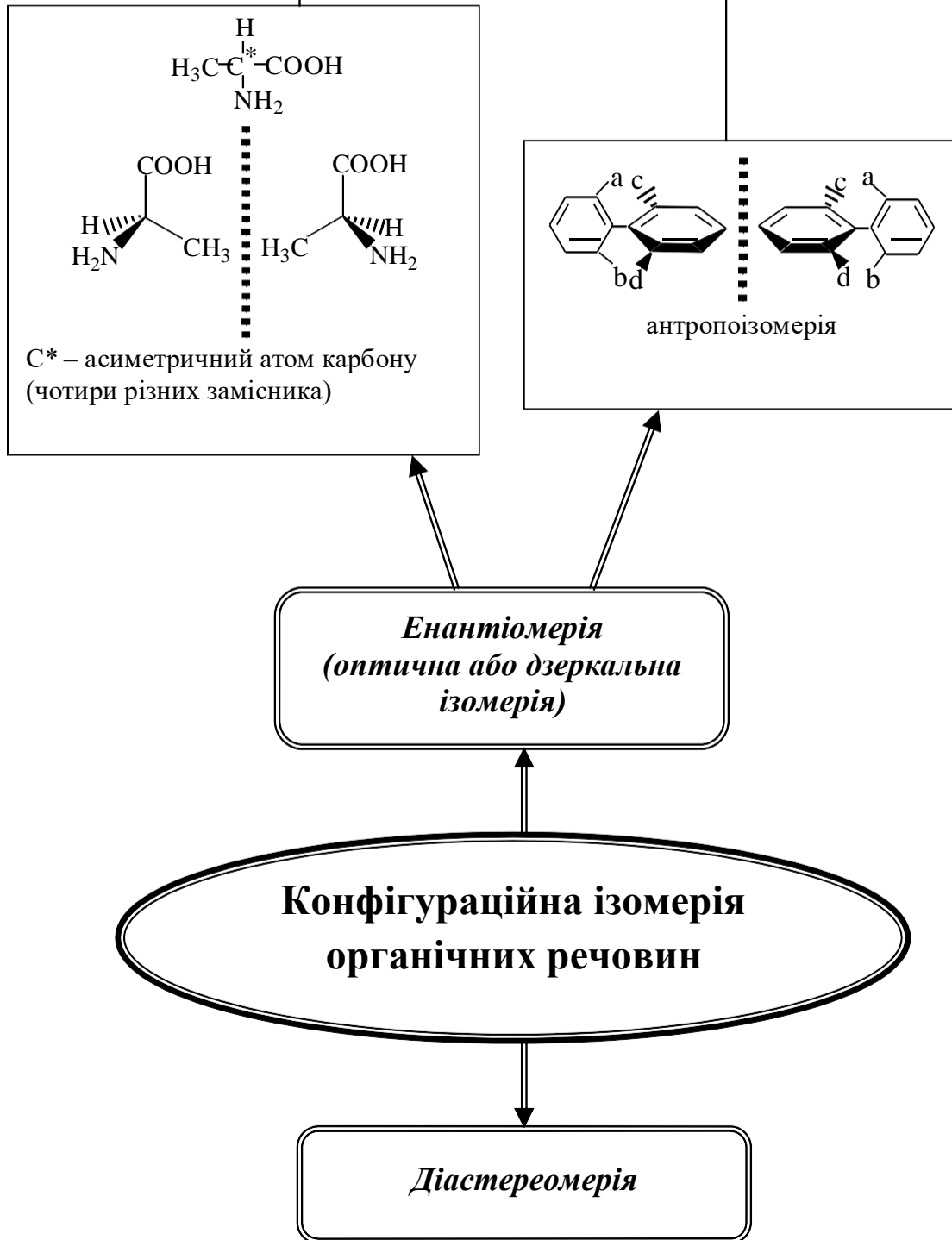
Оптична активність – обертання плоскополяризованого світла:

(+) – правообертаюча молекула

(-) – лівообертаюча молекула

$$[\alpha] = \frac{\alpha}{l \cdot d} \text{ (питомий кут обертання)}$$

(±) – рацемат



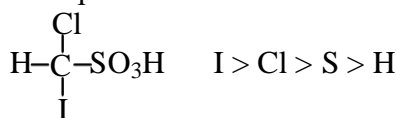
Енантіомери з асиметричним атомом карбону

Позначення конфігурацій:
R та *S*

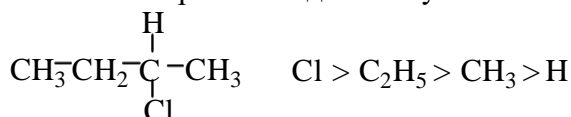
Алгоритм визначення конфігурації:

1. Визначити старшинство замісників, виходячи з правила старшинства (правило Кана-Інгольда-Прелога):

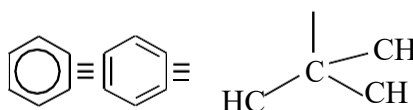
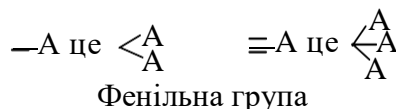
а) старшинство залежить від заряду ядра атома (протонного числа). Найстаршим буде атом з більшим протонним числом:



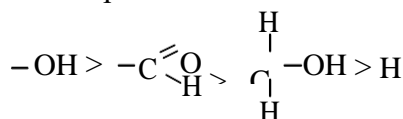
б) якщо старшинство груп неможливо визначити за допомогою правила а), то необхідно провести аналогічне порівняння для наступних атомів в групах:



в) атом, що зв'язаний подвійним чи потрійним зв'язком, вважається відповідно за два чи за три атома:

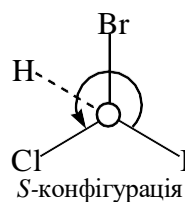
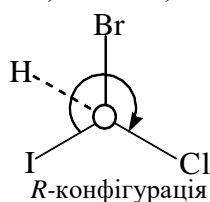


але реальні дві чи три групи А старші за А з подвійним чи потрійним зв'язком.



2. Розташувати молекулу так, щоб молодша група була направлена від спостерігача.

3. Розглянути розташування груп, що залишилися. Якщо старшинство цих груп зменшується за годинниковою стрілкою, то конфігурацію позначають символом *R* (*rectus* (лат.) – правий); якщо навпаки (проти годинникової стрілки) – символом *S* (*sinister* (лат.) – лівий):



Проекційні формули Фішера

Переведення клиноподібних формул у проекційні формули Фішера

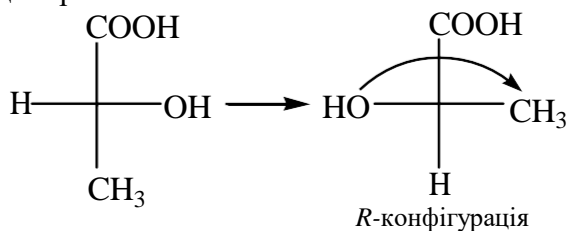
Малюють хрест і на кінцях розміщують чотири групи, які зв'язані з асиметричним атомом карбону.
Асиметричний атом карбону знаходиться в точці перехрещення ліній.
Горизонтальна лінія відповідає зв'язкам, що направлені від площини паперу до спостерігача, а вертикальна – зв'язкам, що направлені від спостерігача

Стандартизація проекційних формул Фішера

1. Головну характеристичну групу (якщо вона стоїть наприкінці ланцюга) прийнято ставити зверху.
2. Головний ланцюг необхідно розташувати вертикально.
3. Щоб перевести “нестандартно” написану формулу в “стандартну” необхідно використовувати правила користування проекційними формулами

Позначення конфігурацій R і S в проекційних формулах

1. Шляхом парних перестановок перевести молодший замісник донизу.
2. Розглянути розташування останніх груп за правилом Кана-Інгольда-Прелога:

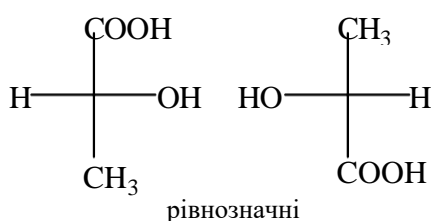


Правила користування проекційними формулами Фішера

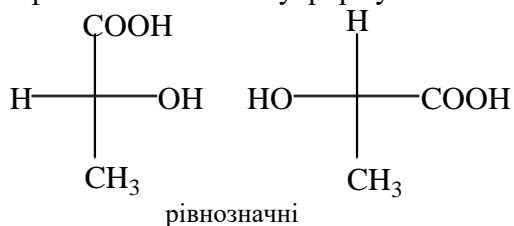
Проекційні формули Фішера

Правила користування проекційними формулами Фішера

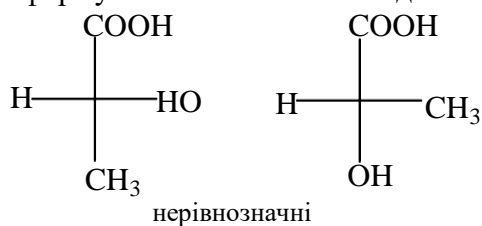
1. Формули можна обертати в площині креслення на 180° , не змінюючи їх стереохімічного сенсу:



2. Дві (чи будь-яке парне число) перестановки замісників у одного асиметричного атома карбону не змінює стереохімічного сенсу формули:

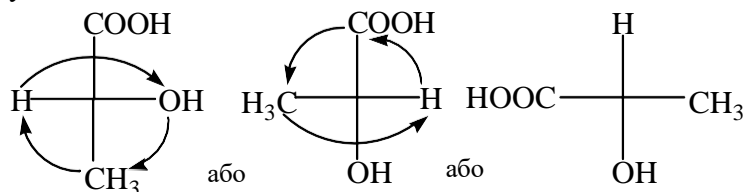


3. Одна (чи будь-яке непарне число) перестановок замісників у асиметричного атома карбону приводить до формули оптичного антипода:



4. Поворот у площині креслення на 90° перетворює формулу на антипод.

5. Замість перестановок, проекційні формули можна перетворювати шляхом обертання трьох замісників за годинниковою стрілкою чи проти неї, четвертий замісник при цьому положення не змінює:

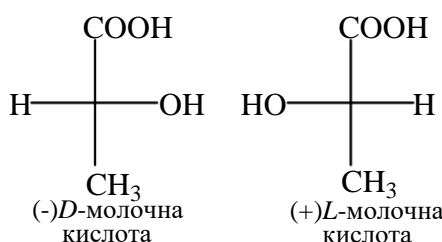
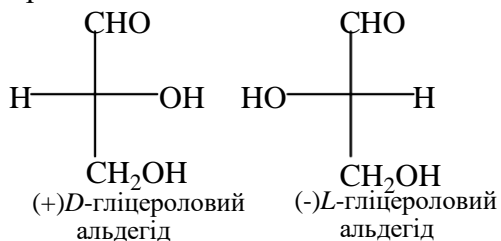


6. Проекційні формули не можна виводити з площини креслення

Відносна конфігурація – порівняння проекційної формули оптично активної речовини з проекційною формулою стандартної речовини.

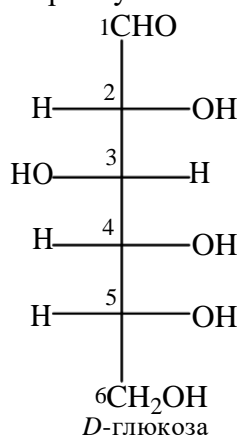
Стандарт – гліцероловий альдегід.

Прийнято:



Знак обертання (+) чи (-) та *D*- і *L*-ряд незв'язані між собою.

В цукрах (гексозах) позначення *D*- та *L*-ряду відноситься до конфігурації п'ятого атома карбону:



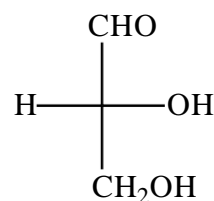
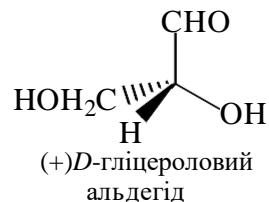
Відносна конфігурація

Відносна та абсолютна конфігурації органічних речовин

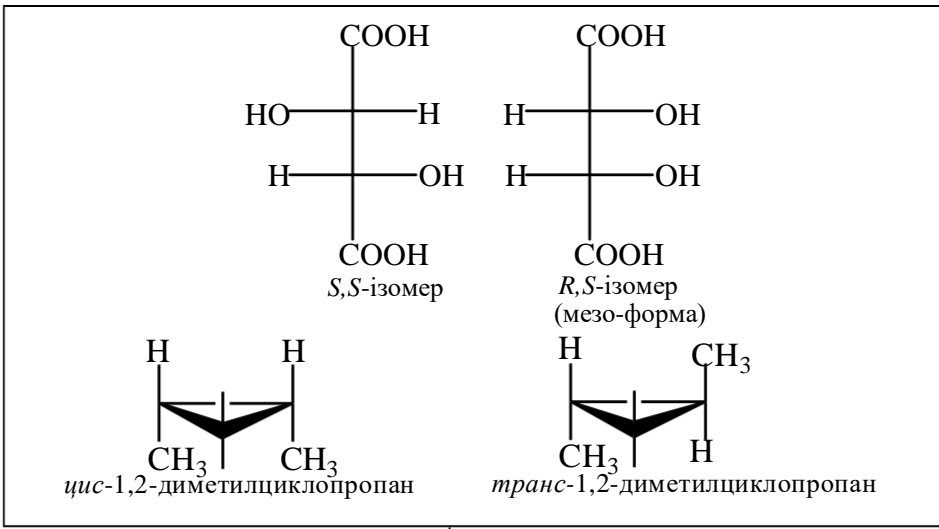
Абсолютна конфігурація

Абсолютна конфігурація – дійсне просторове розташування замісників відносно асиметричного атома карбону.

За допомогою рентгеноструктурного аналізу було доведено, що дійсно *D*-гліцероловому альдегіду відповідає формула:



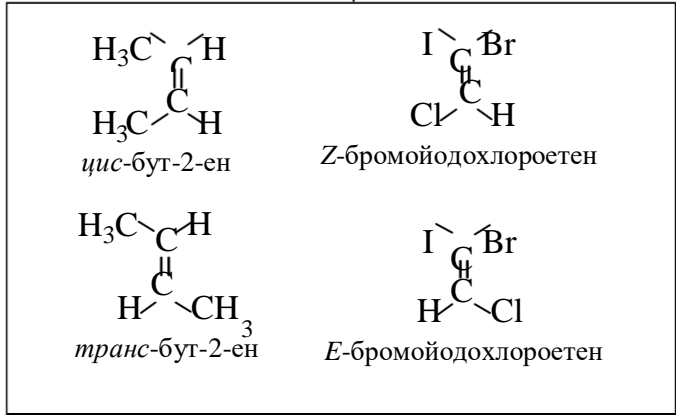
Конфігураційна ізомерія органічних речовин



σ-Діастереомерія

Діастереомерія

π-Діастереомерія
(геометрична ізомерія)

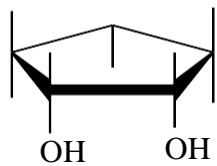


Діастереомерія органічних речовин

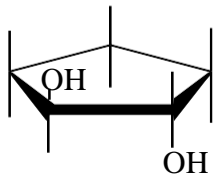
σ -Діастереомерія органічних сполук

Цис-транс-ізомерія циклічних похідних

Циклопентан-1,2-діол



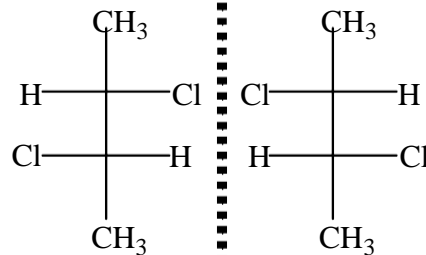
цис-циклопентан-1,2-діол



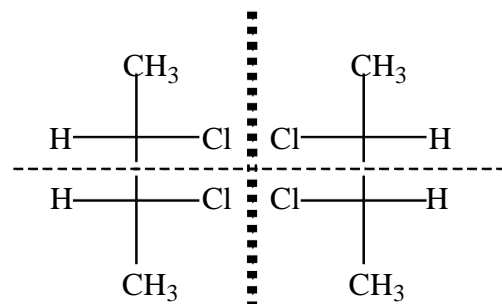
транс-циклопентан-1,2-діол

Мезо-форма у сполук, що мають два і більше асиметричних центрів

Мезо-форма – це сполука, молекули якої сумісні з їх дзеркальним зображенням, хоч вони і мають асиметричний атом карбону:



енантіомери



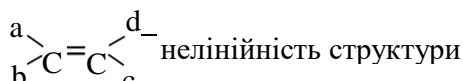
мезо-форма

Діастереомерія органічних речовин

π-Діастереомерія органічних речовин

π-Діастереомери мають *неоднакове розташування замісників відносно площини симетрії π-зв'язку*. Існування таких ізомерів обумовлено *утрудненням обертання навколо подвійного зв'язку*

Умови існування: наявність *π-зв'язку*, який заважає вільному обертанню

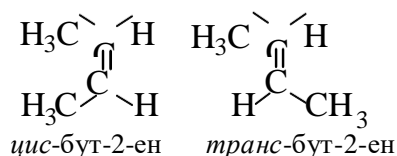


Цис-транс-ізомерія

Необхідна і достатня умова, коли у сполуці $abC=Ccd$: $a \neq b$ і $c \neq d$, а також можливо $a=c$ і $b=d$.

Для позначення ізомерів використовують префікси *цис-* і *транс-*.

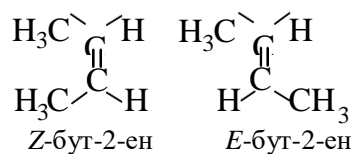
Однозначний результат тільки тоді, коли у кожного з атомів карбону при подвійному зв'язку, знаходиться хоча б по одній однаковій групі. *Цис-* – однакові групи по один бік, *транс-* – по різні боки від подвійного зв'язку:



E-, Z-номенклатура

Позначення *E-, Z-* можна використовувати коли у сполуці $abC=Ccd$: $a \neq b \neq c \neq d$.

Спочатку визначають порядок старшинства (відповідно правилу старшинства) двох замісників, що стоять біля кожного з атомів карбону при $C=C$ зв'язку: *Z-* – старші замісники стоять по один бік кратного зв'язку, *E-* – старші замісники по різні боки від подвійного зв'язку:



E- і *Z-* не завжди збігається з *цис-*, *транс-*:

