

# NOMENCLATURA R – S

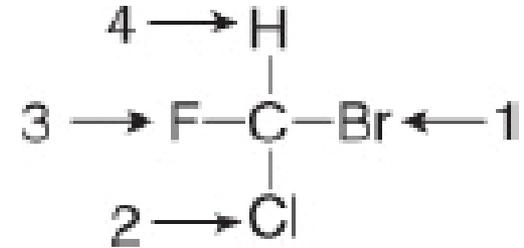
## Configurazione assoluta

- 1. Ordina gli atomi direttamente attaccati al centro chirale in base al numero atomico**
- 2. Se questi sostituenti hanno altri legami, guarda il secondo, il terzo, . . . fino a trovare una differenza**
- 3. Legami multipli sono multipli dello stesso atomo**
- 4. Ruota il gruppo a minor priorità in alto; collega con una linea curva i gruppi a maggiore priorità secondo un ordine decrescente; se gira in senso orario sarà R, se in senso antiorario S**

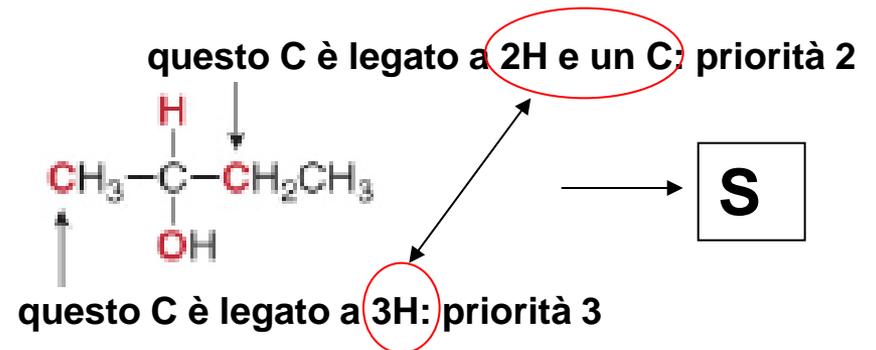
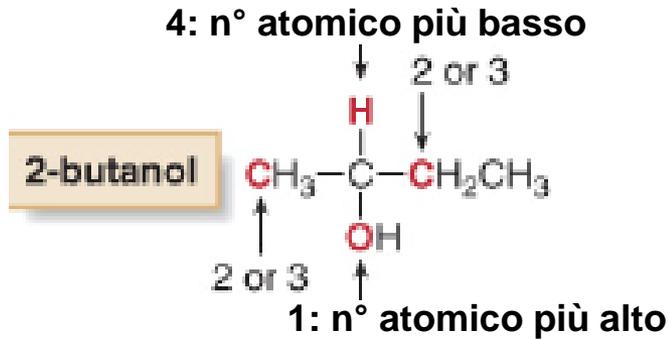
# CONFIGURAZIONE ASSOLUTA

1. Priorità dei gruppi direttamente legati

**R**

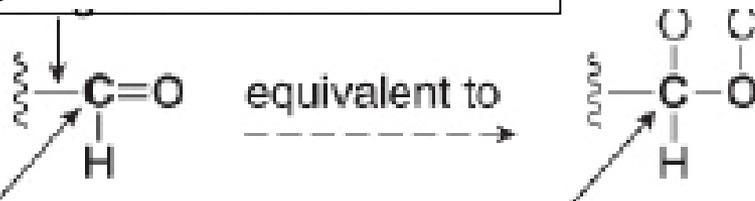


2. Se al 1° livello sono uguali segui gli atomi lungo i legami

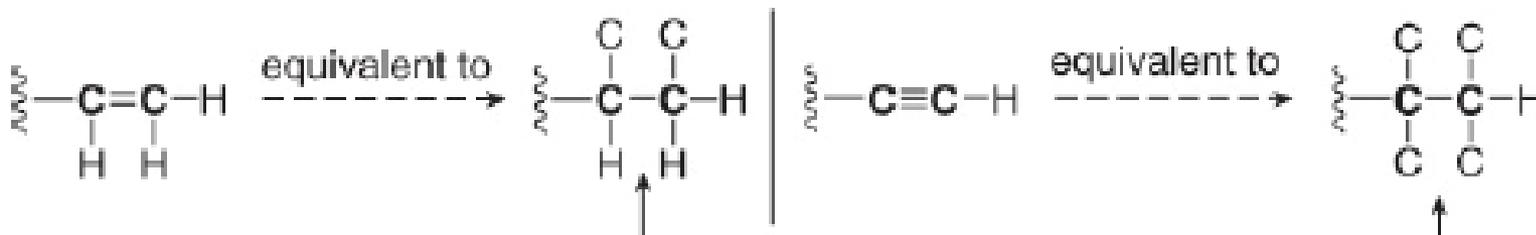


3. Se ci sono legami multipli, trattali come un numero equivalente di legami singoli. Es.  $C=O$ , il C è come se fosse legato a 2 O

Legato a uno stereocentro



C come legati a 2 O

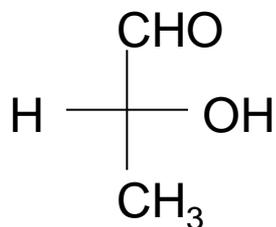


Ogni atomo del doppio legame è legato a 2 C

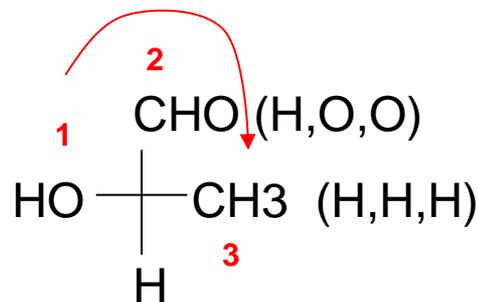
Ogni atomo del legame triplo è legato a 3 C

# R – S E PROIEZIONI DI FISCHER

Per un posizionamento dei sostituenti corretto ai fini dell'individuazione della chiralità R o S, occorre mettere il sostituito a priorità più bassa (se presente è l'atomo di idrogeno) o in alto o in basso nelle Proiezioni di Fischer (gruppo posteriore)



CHO fermo, interconversione  
oraria degli altri 3 gruppi



**R**

**Se una molecola presenta n centri stereogeni il numero massimo di stereoisomeri =  $2^n$  ( $2^n / 2$  diastereoisomeri , ciascuno di essi in coppia enantiomerica)**

**Diastereoisomeri = stereoisomeri che non sono immagini speculari- proprietà fisiche diverse**

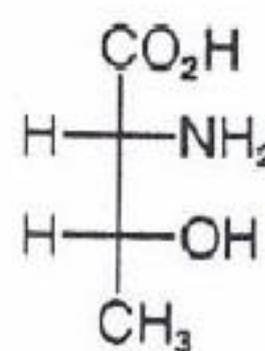
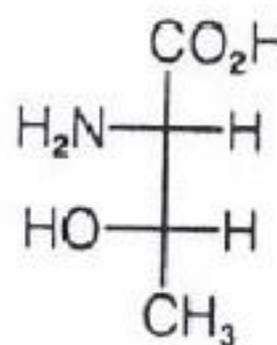
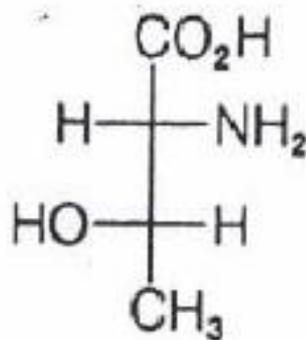
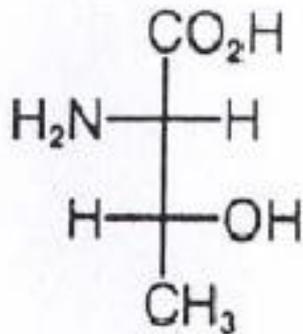
<b>n = 1</b>	<b>2 Stereoisomeri</b>	<b>1 Coppia enantiomerica</b>
<b>n = 2</b>	<b>4 Stereoisomeri</b>	<b>2 Coppie enantiomeriche</b>
<b>n = 3</b>	<b>8 Stereoisomeri</b>	<b>4 Coppie enantiomeriche</b>
<b>n = 4</b>	<b>16 Stereoisomeri</b>	<b>8 Coppie enantiomeriche</b>

.....

**In presenza di elementi di simmetria il n° di stereoisomeri diminuisce.**

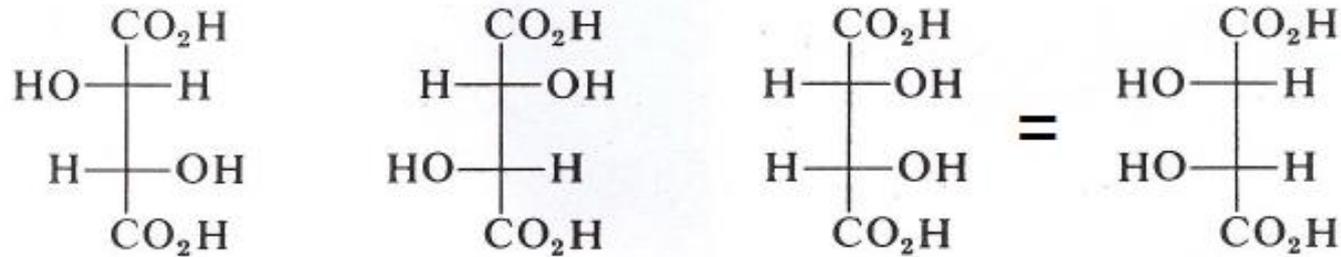
Per  $n = 2 \rightarrow 4$  stereoisomeri - Es.: Treonina e allotreonina (ciascuno in coppia enantiomerica) sono diastereoisomeri

Acido 2-amino-3-idrossi butanoico



Nome	L-treonina	D-treonina	L-allotreonina	D-allotreonina
$P_f$ °C	251-253	251-252	268-272	269-272
$[\alpha]_D^{20}$	-28,5°	+28,5°	+9,6°	-9,1°

# ACIDO TARTARICO: STEREOISOMERI



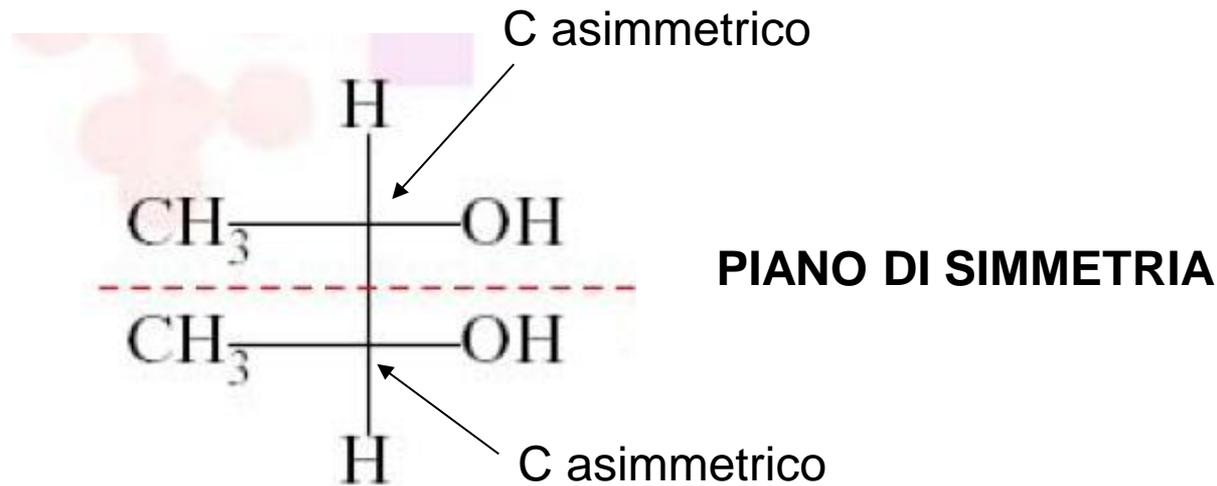
ENANTIOMERI

COMPOSTO MESO

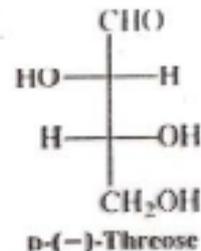
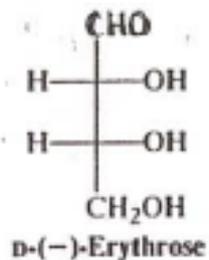
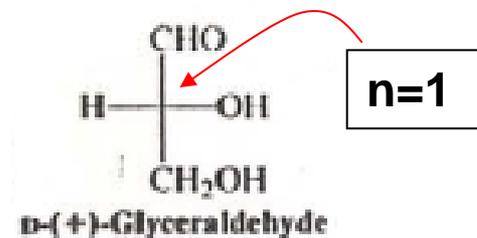
COMPOSTO	$[\alpha]_D^{20}$	$P_f$ °C	DENSITA' g/ml	SOLUBILITA' H2O (25°C)
meso		140	1,666	120
-	-11,98	170	1,76	147
+	+11,98	170	1,76	147

**COMPOSTO MESO:** contiene centri chirali ma complessivamente la molecola è achirale.

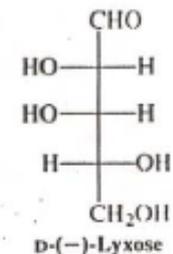
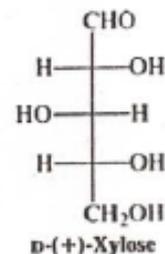
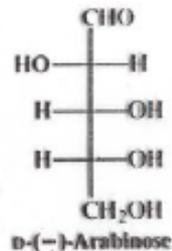
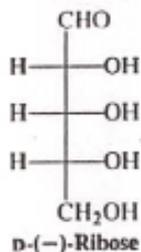
La molecola ha un piano di simmetria interno



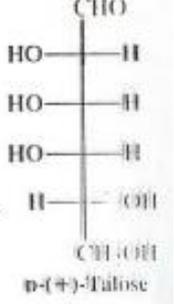
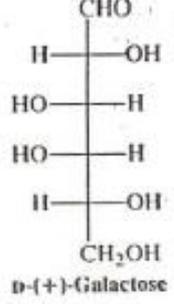
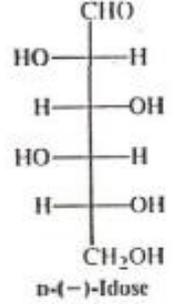
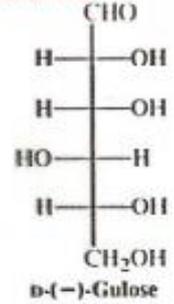
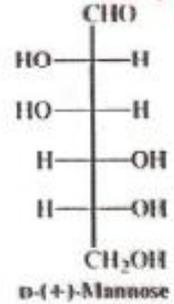
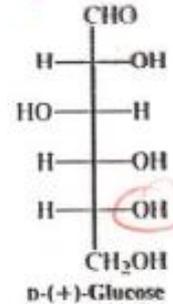
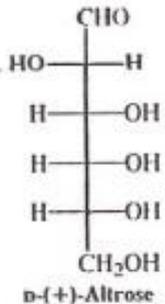
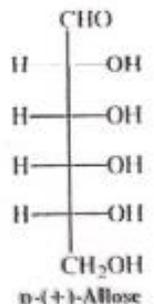
Per  $n$  centri stereogeni si hanno  $2^n/2$  diastereoisomeri, ognuno in coppia enantiomerica



n=2



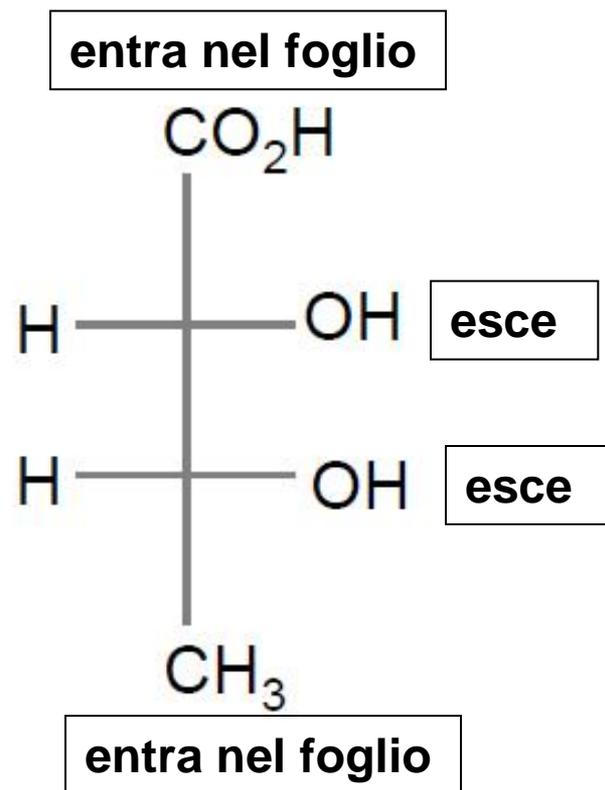
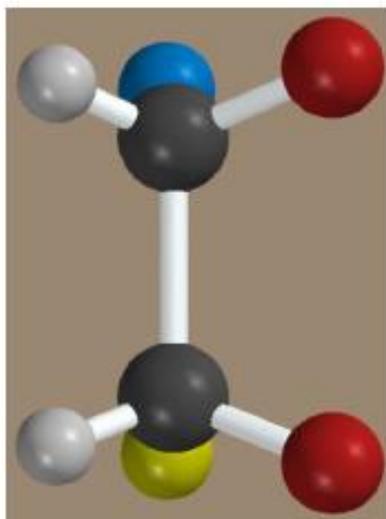
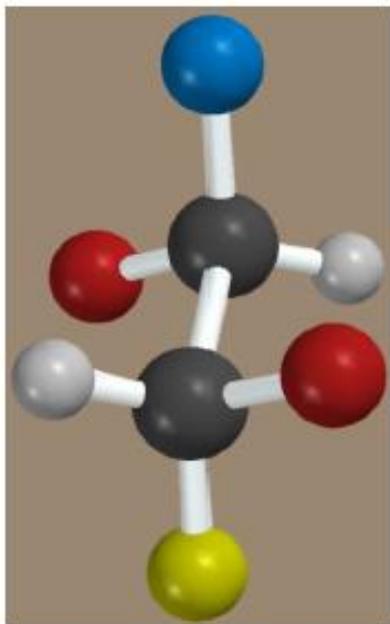
n=3



n=4

# PROIEZIONI DI FISCHER DI UNA MOLECOLA CON 2 CENTRI STEREOGENICI

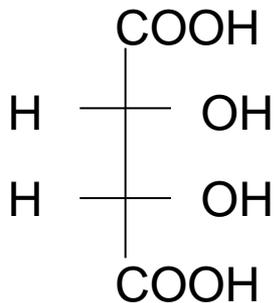
Prendi la molecola nella **conformazione eclissata** poi costruisci la proiezione di Fischer



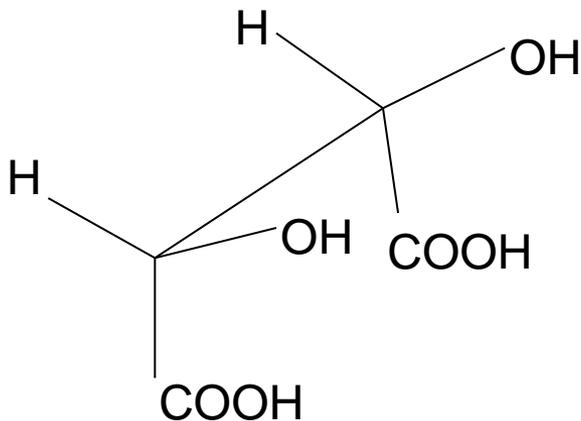
Acido 2,3-diidrossi butanoico

# ASPETTI NOTAZIONALI

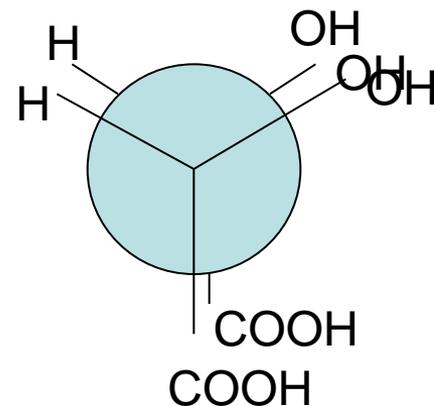
proiezioni di Newman- formule di Fischer- strutture a cavalletto



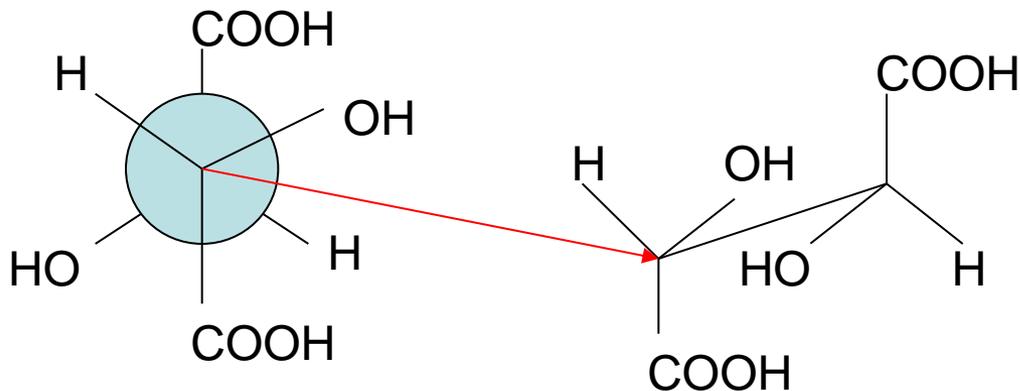
Fischer



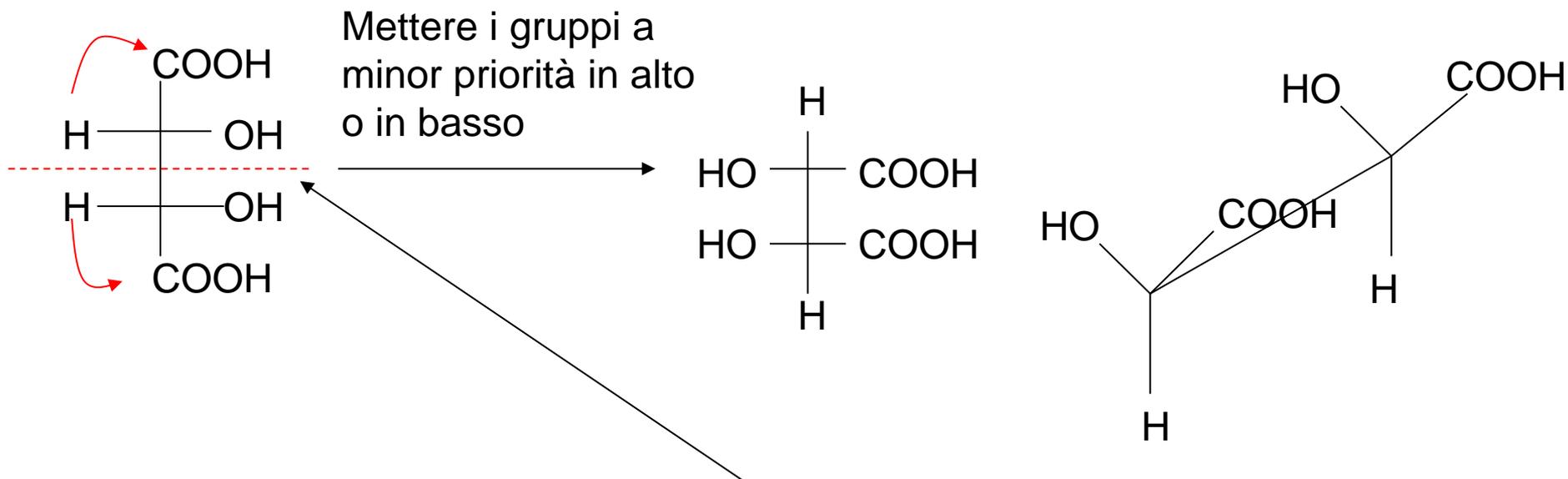
Cavalletto



Newman



# Nomenclatura R - S



**Composto MESO: piano di simmetria intero**

**Due centri stereogenici uno R e l'altro S (sono evidentemente uno l'immagine speculare dell'altro).**

**$[\alpha] = 0$  per autocompensazione**

**L'altro stereoisomero chirale sarà presente come coppia enantiomerica: RR e SS**

# Separazione di enantiomeri

mediante o formazione di nuovi legami o interazioni intermolecolari con una specie chirale (per esempio dal pool biologico chirale) passaggio dal rapporto enantiomerico a quello diastereoisomerico (proprietà fisiche diverse - possibilità di separare i diastereoisomeri sfruttando ad es. la solubilità, le proprietà cromatografiche ecc.

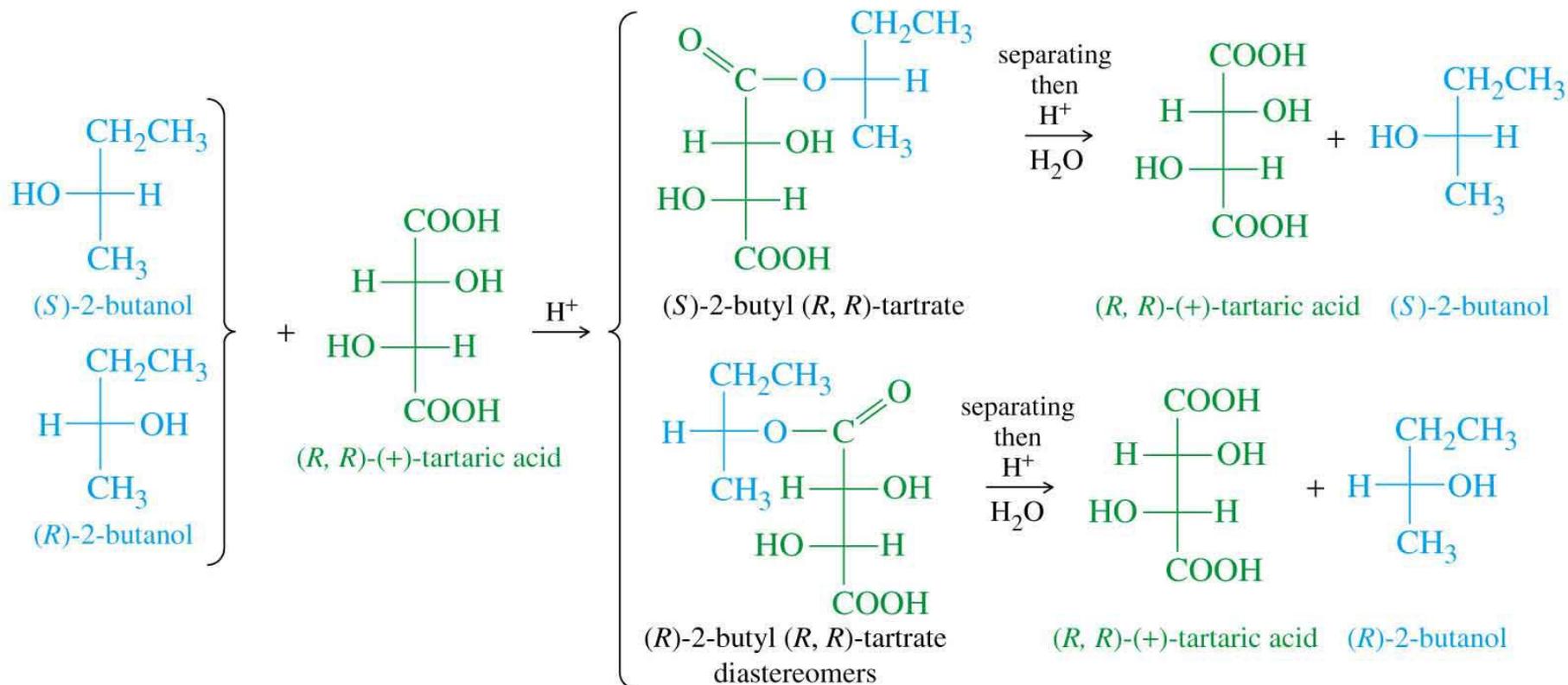
Es.:

Separazione di  $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{C}_2\text{H}_5$  (miscela racema R+S) mediante reazione con un acido chirale es. a chiralità  $S^1$   
 $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{COOH} \rightarrow R^1\text{COO}-\text{RNH}_3^+$  (formazione del sale)

Sale con due centri stereogeni a chiralità R- $S^1$  e S- $S^1$  -> Rapporto diastereoisomerico - Separazione per cristallizzazione frazionata.

# RISOLUZIONE DI ENANTIOMERI

Si fa reagire una miscela racemica con un composto chirale per formare stereoisomeri che possono essere separati



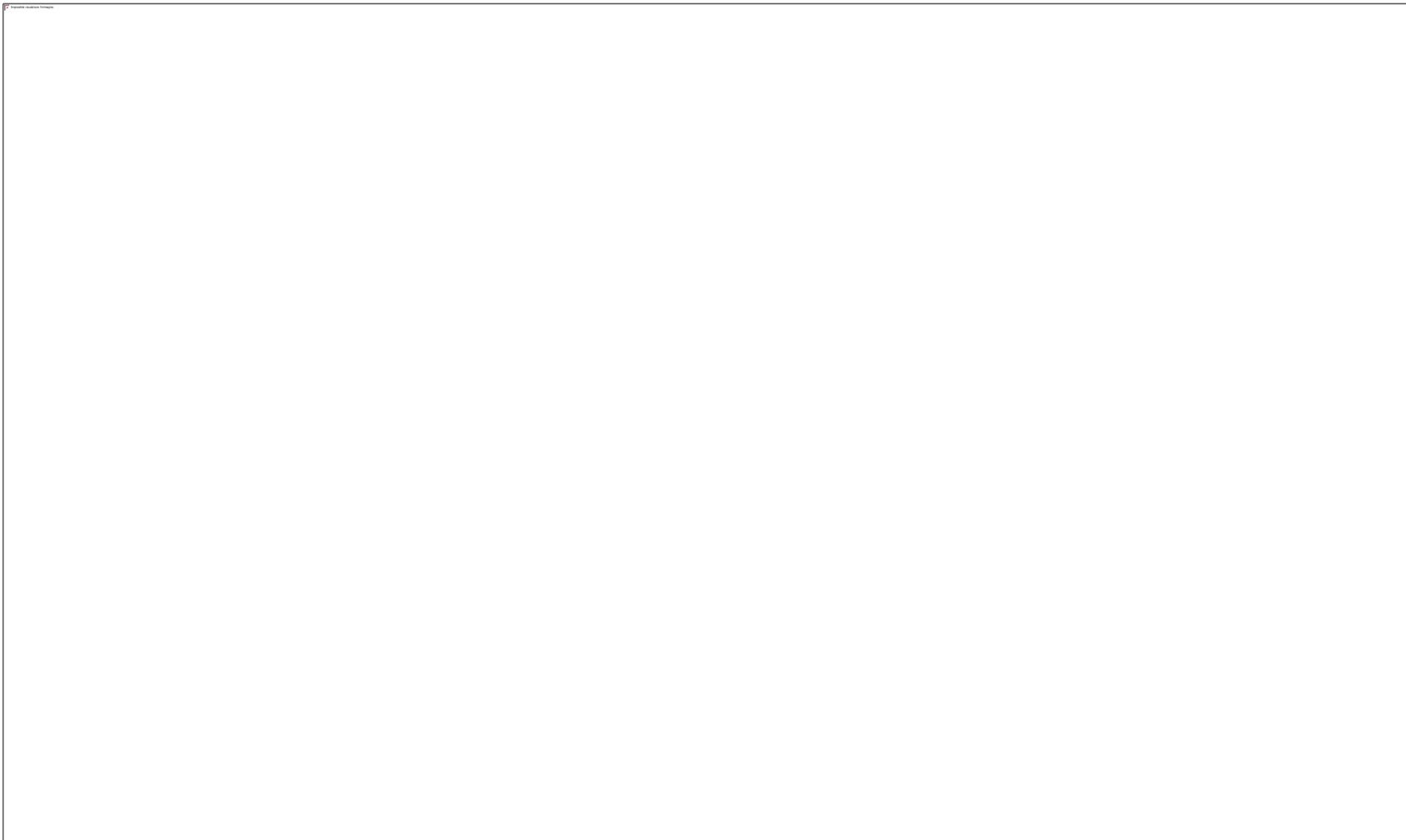
**Una reazione che porta alla formazione di un centro stereogeno in assenza di qualsiasi elemento di chiralità (substrato - reagente - catalizzatore - solvente - tutti achirali) porta ad una miscela racema.**

**Prochiralità (da Biochimica) = Molecola achirale che può essere convertita in chirale con una sola reazione (ad esempio sostituzione su alcani - addizione su alcheni  $R^1R^2C=CR^3R^4$  o su chetoni  $R^1R^2C=O$ ).**

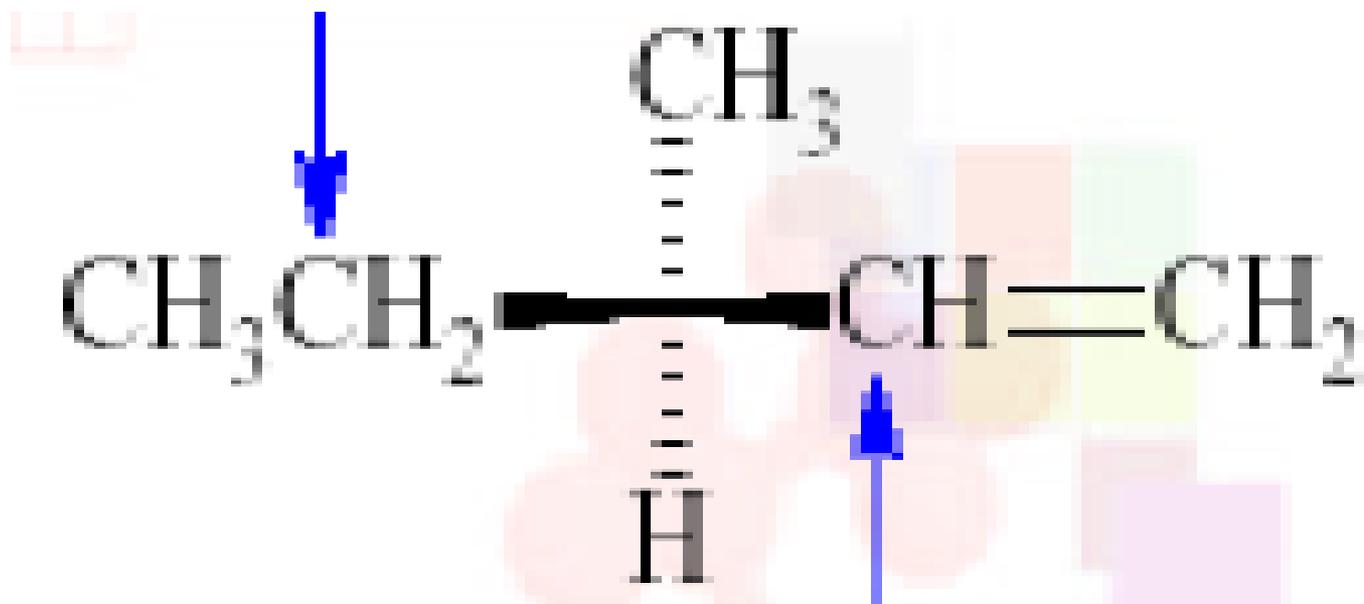


**CH<sub>2</sub> centri prochirali - Si ottiene una miscela racema**

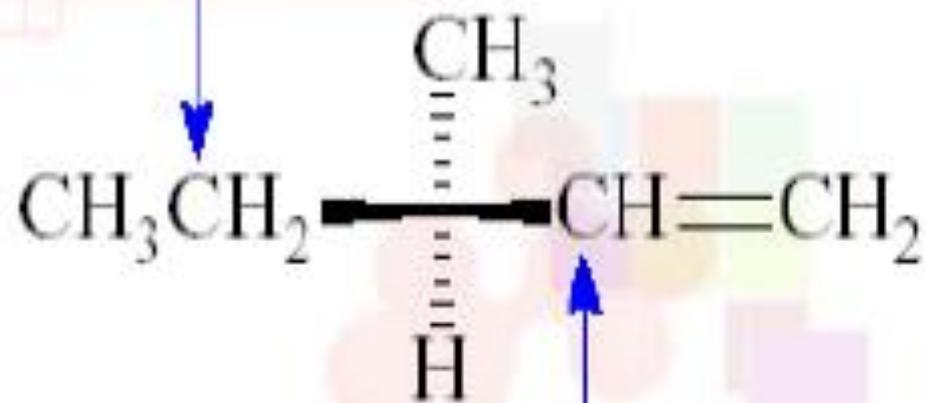
# ESERCIZI



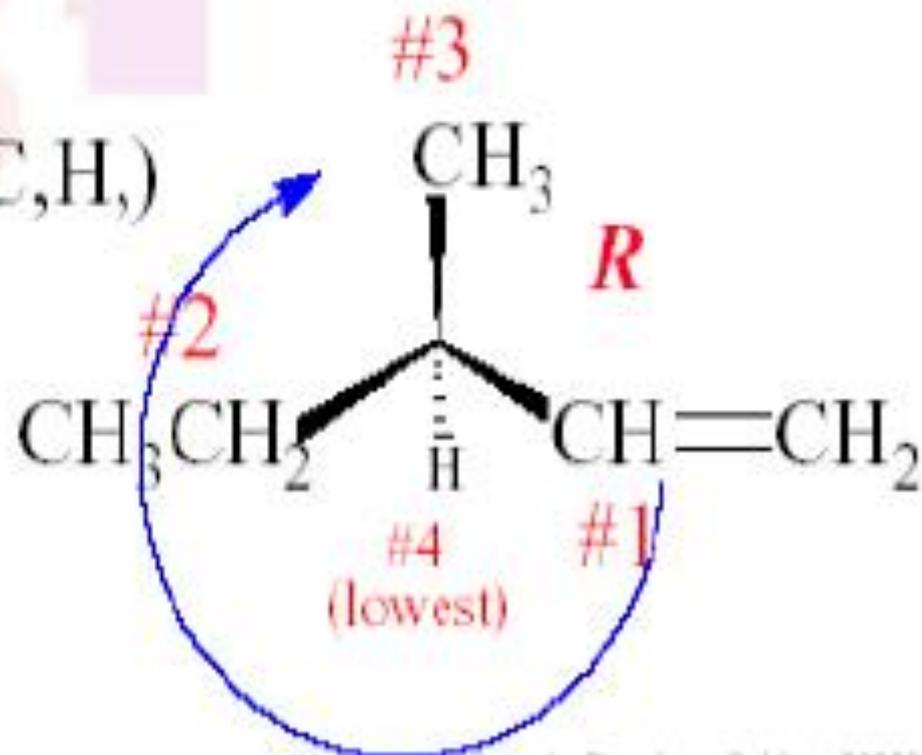
# DETERMINA LA CONFIGURAZIONE ASSOLUTA



(C,H,H) (H,H,H)

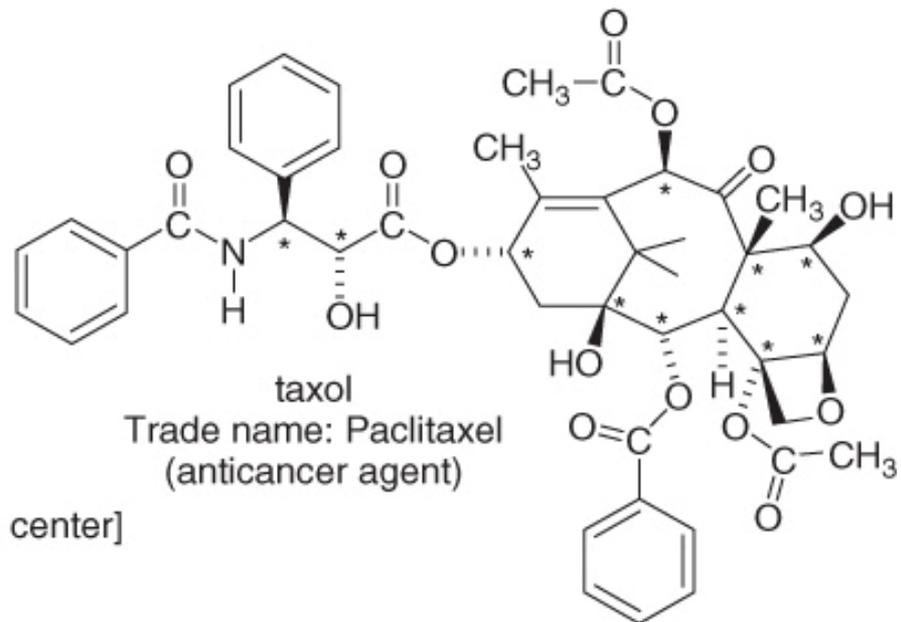
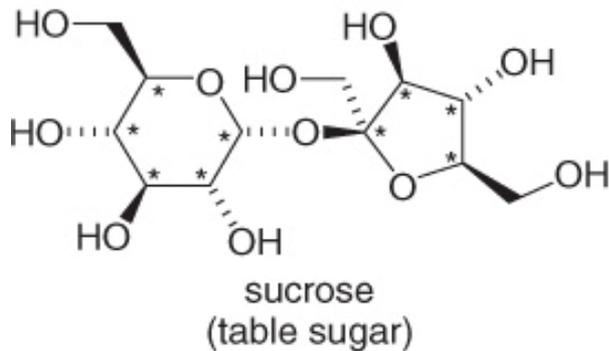
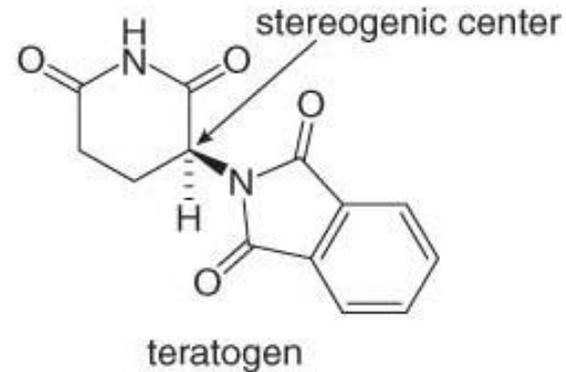
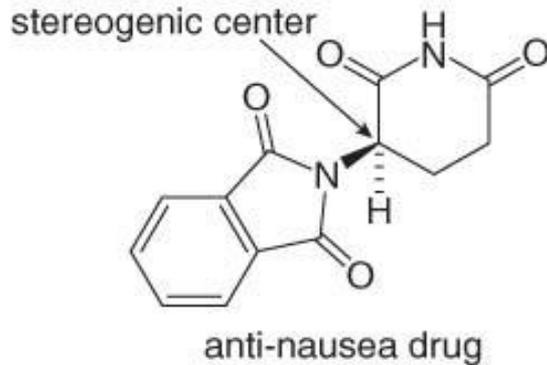


(C,C,H)



# Molte molecole biologicamente attive contengono centri stereogenici sui carboni dell'anello

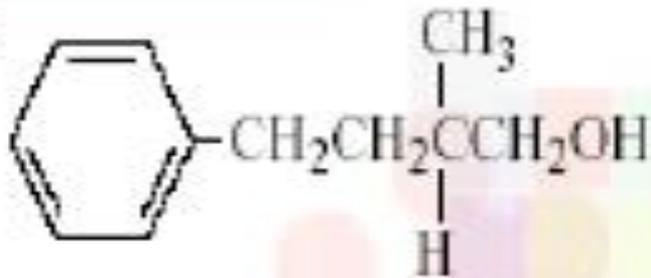
Two enantiomers of thalidomide



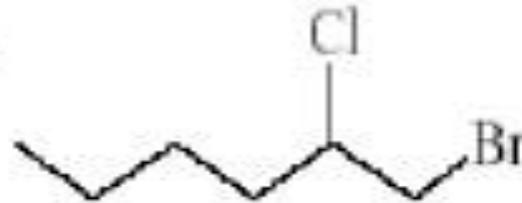
[\* = stereogenic center]

Per ciascuna delle molecole indica, se esistono, i centri chirali (usa un \*)

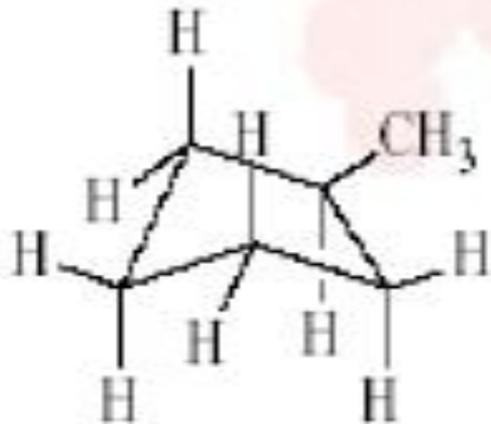
a.



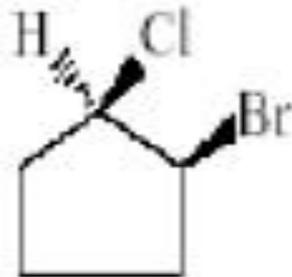
b.



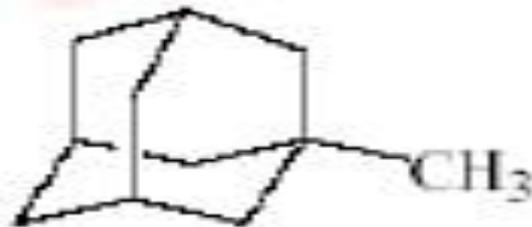
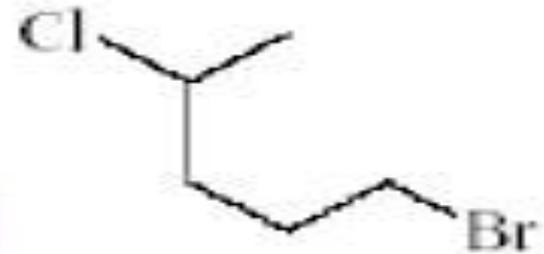
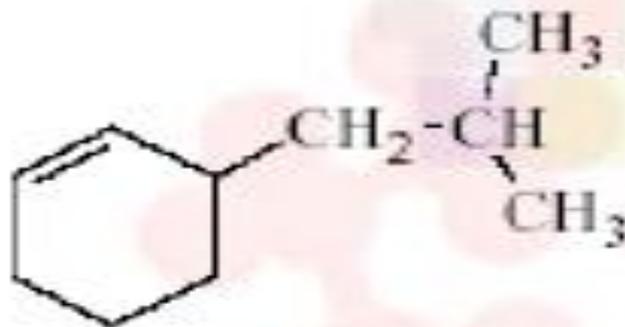
c.



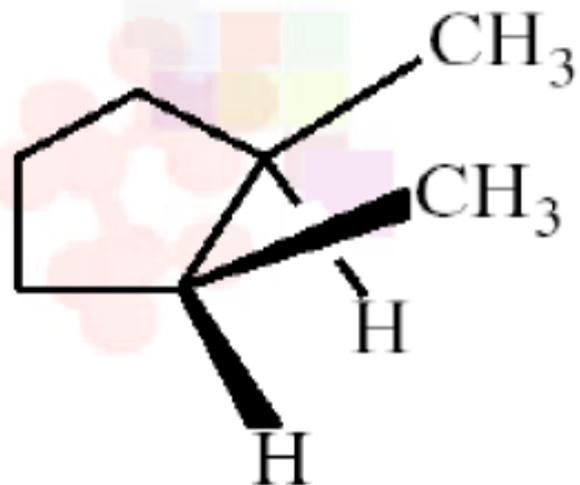
d.



Per ciascuna delle molecole indica, se esistono, i centri chirali (usa un \*)



Indica, se esistono, i centri chirali (usa un \*). La molecola è chirale?

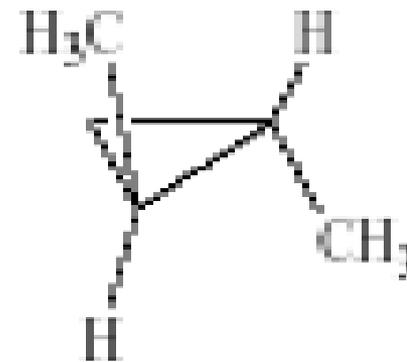
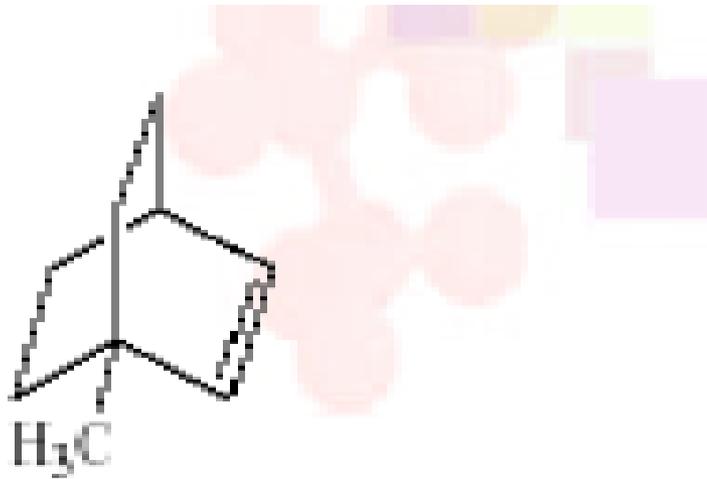


**Indica:**

**1. Il numero di centri chirali**

**2. Se non ne contiene indica “achirale”**

**3. Se è un composto meso non indicare i centri chirali ma scrivi “meso”**

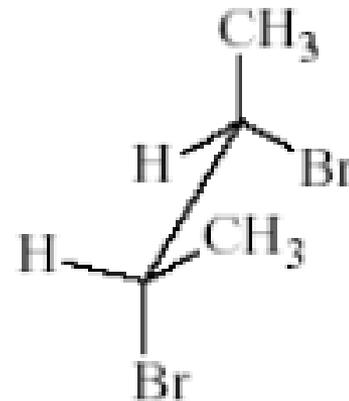
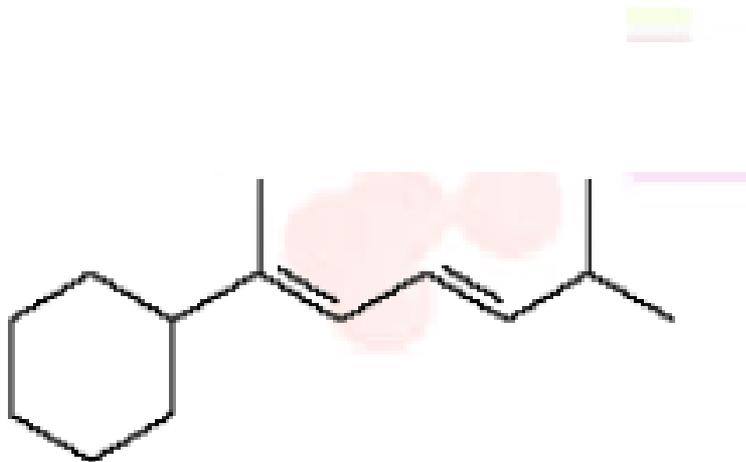


**Indica:**

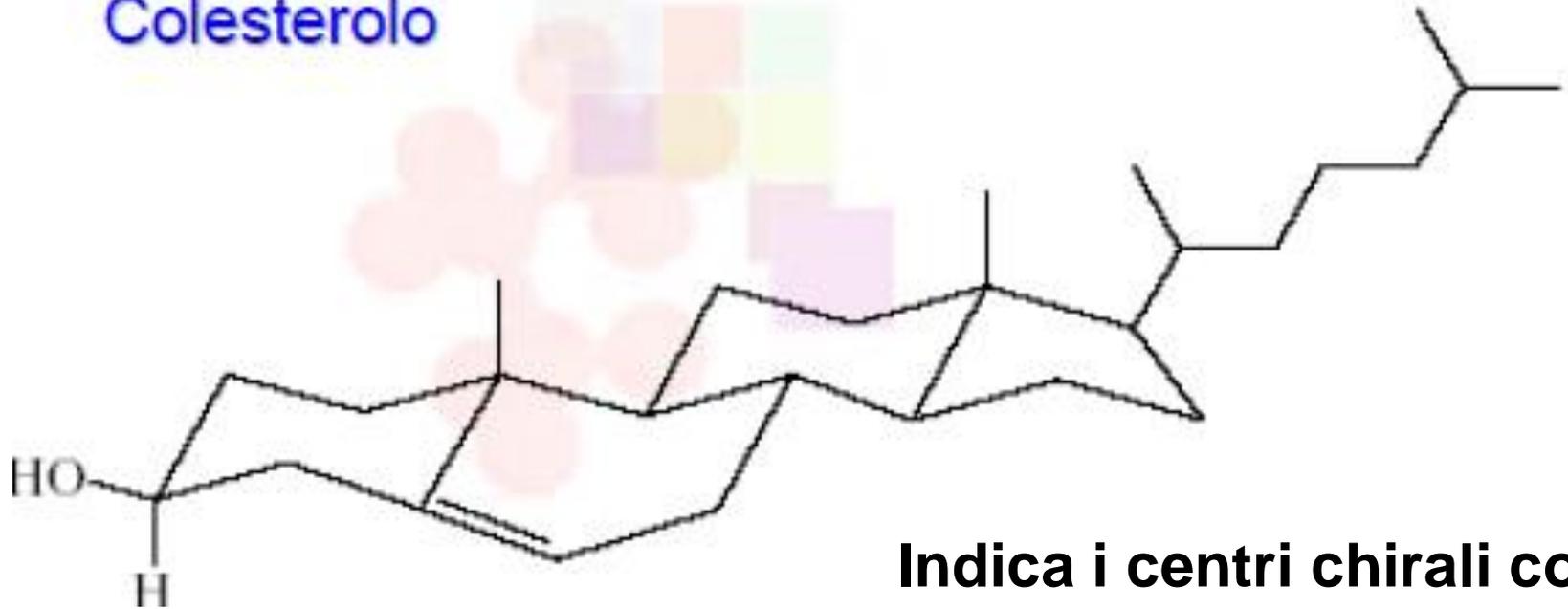
**1. Il numero di centri chirali**

**2. Se non ne contiene indica “achirale”**

**3. Se è un composto meso non indicare i centri chirali ma scrivi “meso”**



## Colesterolo



**Indica i centri chirali con un asterisco**

**Individuare, se presenti, i centri stereogeni in queste molecole, gli eventuali diastereoisomeri e le eventuali forme meso.**

**Tutti gli isomeri aventi formula  $C_7H_{16}$  (nove isomeri):**

**Catena lineare -> 1 isomero**

**$C_6 + C_1$  -> 2 isomeri (1 chirale)**

**$C_5 + C_2$  -> 5 isomeri (1 chirale)**

**$C_4 + C_3$  -> 1 isomero**

**Tutti gli 1,2-Dimetilcicloesani isomeri ed i rispettivi prodotti di monobromurazione (+  $Br_2$  - meccanismo radicalico).**

## **ISOMERI**

**Composti diversi  
con la stessa  
formula molecolare**

## **ISOMERI COSTITUZIONALI**

**Isomeri con atomi  
attaccati in modo diverso**

## **STEREoisomeri**

**Isomeri con atomi attaccati  
nello stesso ordine ma con  
una diversa configurazione  
spaziale dei gruppi**

## **ENANTIOMERI**

**Stereoisomeri  
immagini speculari  
uno dell'altro ma  
non sovrapponibili**

## **ISOMERI CIS-TRANS**

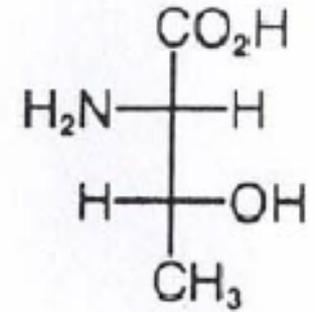
**Isomeri geometrici**

## **DIAStereoisomeri**

**Stereoisomeri che non  
sono l'immagine  
speculare l'uno dell'altro**

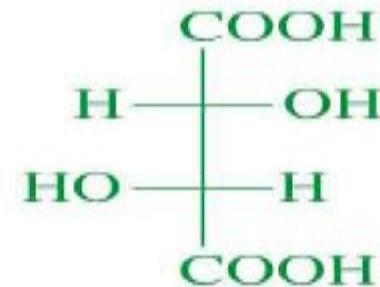
## Esercizi sulla nomenclatura R o S di centri stereogeni

Analizzare la chiralità dei due enantiomeri della Treonina e della Allotreonina



L-threonine\*

Analizzare la chiralità dei tre stereoisomeri dell'Acido tartarico (di fianco uno stereoisomero).



Analizzare la chiralità del D-Threose (di fianco uno stereoisomero)

