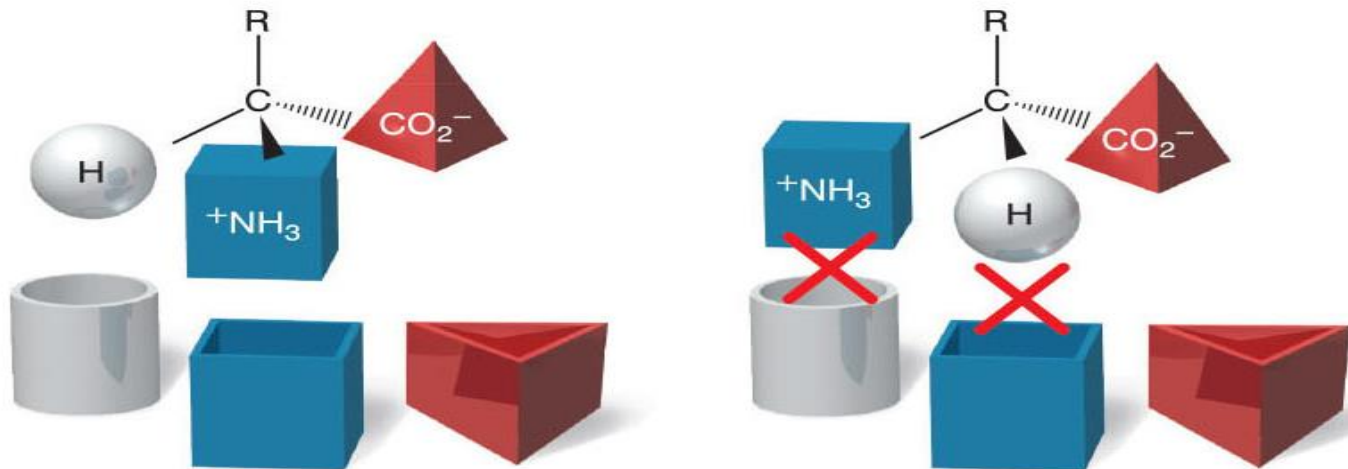


Στερεοχημεία

Η τρισδιάστατη δομή ενός μορίου μπορεί να επηρεάσει σε μεγάλο βαθμό τις φυσικές και χημικές του ιδιότητες.

Στα φαρμακευτικά προϊόντα, μικρές διαφορές στην διάταξη στο χώρο μπορεί να ευθύνονται για τη διαφορά μεταξύ της στοχευόμενης θεραπείας και των ανεπιθύμητων παρενεργειών.



Ισομερή που έχουν τον ίδιο τρόπο σύνδεσης των ατόμων τους αλλά διαφορετική διάταξη στο χώρο καλούνται ΣΤΕΡΕΟΙΣΟΜΕΡΗ.

Ισομερή

Τα ισομερή είναι ΜΗ ταυτόσημα μόρια που έχουν τον ίδιο μοριακό τύπο

Τα ισομερή διακρίνονται σε δύο κατηγορίες:

Ισομερή

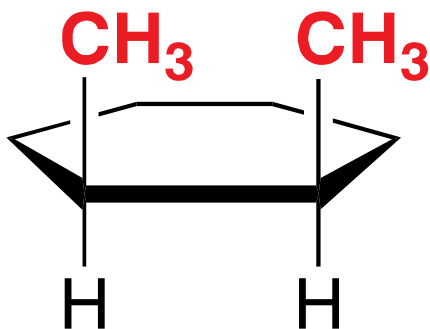
Συντακτικά Ισομερή

Ίδιος μοριακός τύπος,
αλλά διαφορετική σύνταξη
(σειρά σύνδεσης των ατόμων)

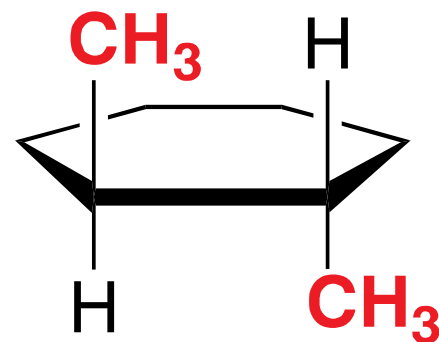
Στερεοϊσομερή

Ίδιος μοριακός τύπος και
σύνταξη, αλλά διαφορετική
χωροδιάταξη των ατόμων

Οι δεσμοί C-C που περιορίζονται σε μία κυκλική δομή δεν μπορούν να περιστραφούν ελεύθερα
Αν και τα δύο παρακάτω μόρια έχουν την ίδια σύνθεση των ατόμων τους, ΔΕΝ είναι ταυτόσημα.

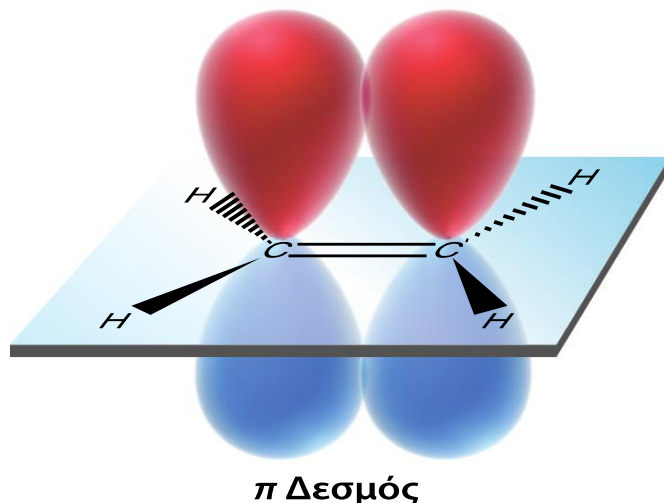


cis-

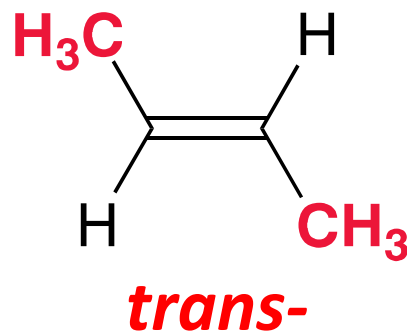
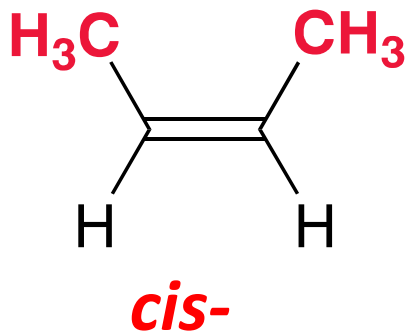


trans-

Για να διατηρηθεί η επικάλυψη των τροχιακών στον π δεσμό, οι διπλοί δεσμοί C=C δεν μπορούν να περιστρέφονται ελεύθερα.



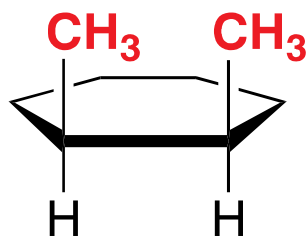
Αν και τα δύο παρακάτω μόρια έχουν την ίδια σύνθεση των ατόμων τους, ΔΕΝ είναι ταυτόσημα



Στους δακτυλίους και στους διπλούς δεσμούς C=C, ο συμβολισμός *cis-trans* χρησιμοποιείται για τη διάκριση μεταξύ των στερεοϊσομερών.

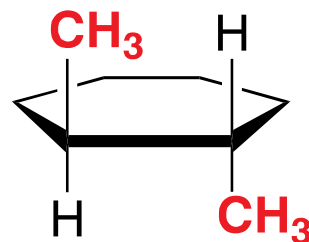
cis – ταυτόσημες ομάδες τοποθετούνται στην **ΙΔΙΑ** πλευρά του δακτυλίου.

trans – ταυτόσημες ομάδες τοποθετούνται σε **ΑΝΤΙΘΕΤΕΣ** πλευρές ενός δακτυλίου.



cis-

1,2-Διμεθυλοκυκλοεξάνιο

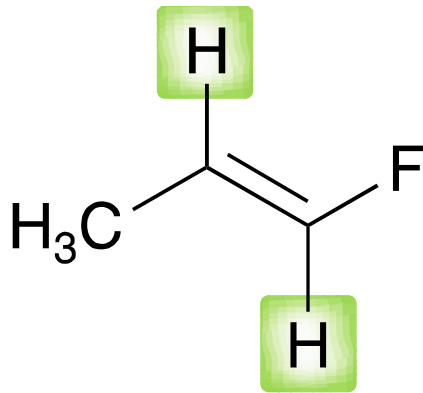


trans-

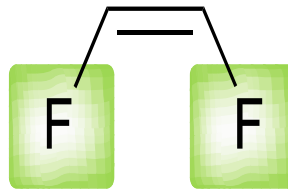
1,2-Διμεθυλοκυκλοεξάνιο

cis – ταυτόσημες ομάδες τοποθετούνται στην **ΙΔΙΑ** πλευρά ενός διπλού δεσμού C=C.

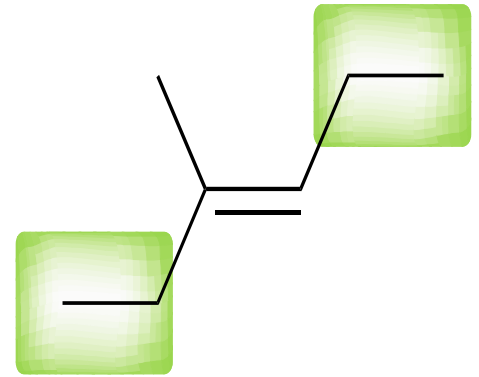
trans – ταυτόσημες ομάδες τοποθετούνται σε **ΑΝΤΙΘΕΤΕΣ** πλευρές ενός διπλού δεσμού C=C.



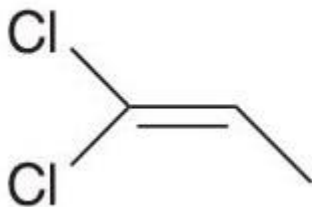
trans εξαιτίας των H



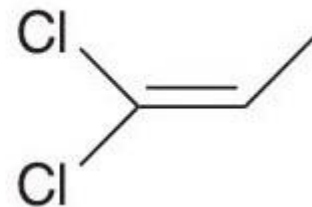
Τα δύο άτομα
φθορίου είναι *cis*



Οι δύο αίθυλο
ομάδες είναι *trans*



είναι ίδια με την



Χειρομορφία

Πέρα από τα ισομερή *cis-trans*, υπάρχουν πολλά άλλα σημαντικά **στερεοϊσομερή**.

Για να προσδιορίσουμε τέτοιου είδους στερεοϊσομερή, πρέπει να είμαστε σε θέση να προσδιορίζουμε χειρόμορφα μόρια.

Ένα **χειρόμορφο** αντικείμενο ΔΕΝ είναι ταυτόσημο με την κατοπτρική του εικόνα.

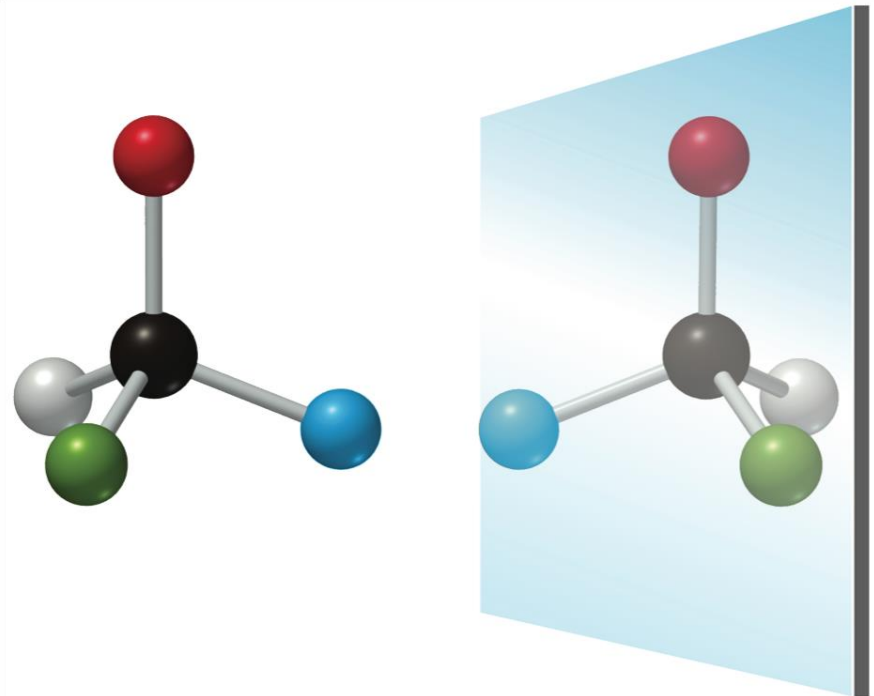
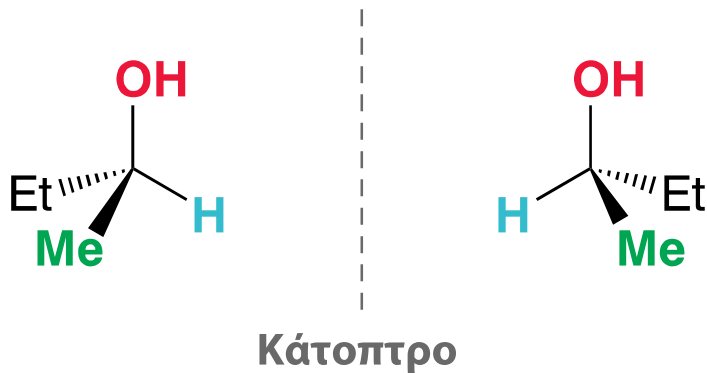
Ενός χειρόμορφου αντικειμένου στον καθρέφτη φαίνεται το είδωλό του.

Μπορούν να ελεγχθούν δύο αντικείμενα εάν είναι ταυτόσημα όταν τοποθετηθούν σε υπέρθεση.

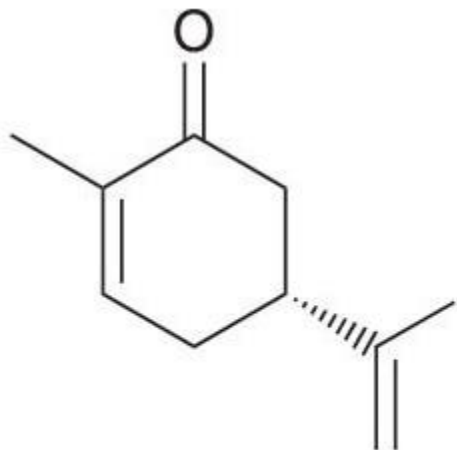
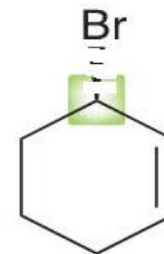
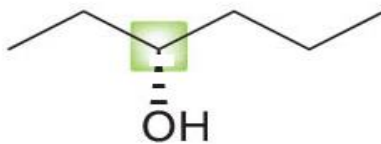
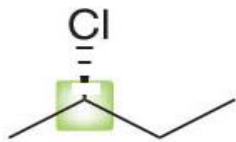
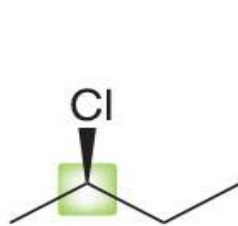


Χειρόμορφα κέντρα

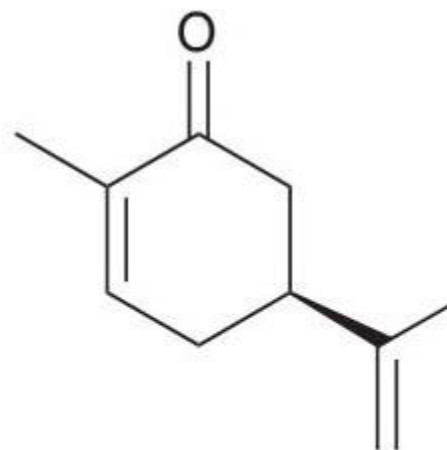
Η χειρομορφία συνηθέστερα προκύπτει όταν ένα άτομο άνθρακα είναι συνδεδεμένο με 4 διαφορετικές ομάδες ατόμων.



Όταν ένα άτομο του άνθρακα σχηματίζει ένα τετραεδρικό κέντρο με 4 διαφορετικές ομάδες συνδεδεμένες σε αυτό, καλείται **χειρόμορφο κέντρο (στερεογονικό κέντρο)**



(R)-Καρβόνη
(Οσμή δυόσμου)



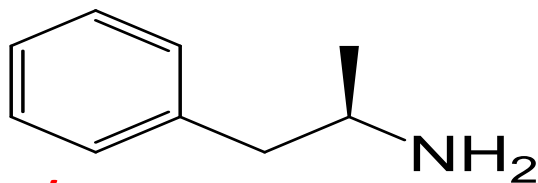
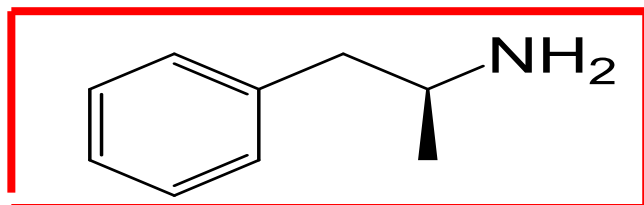
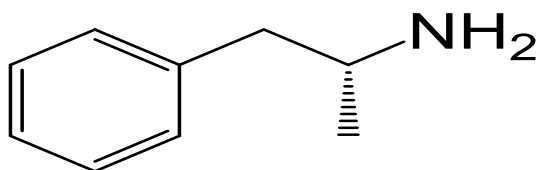
(S)-Καρβόνη
(Οσμή σπόρων κύμινου)

Εναντιομερή

Κάποια στερεοϊσομερή μπορούν επίσης να χαρακτηριστούν ως εναντιομερή.

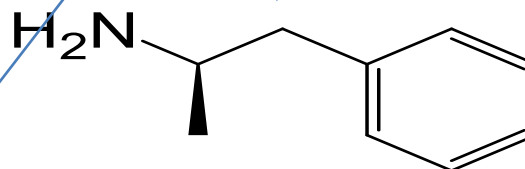
Τα εναντιομερή είναι ΔΥΟ μόρια τα οποία είναι ΚΑΤΟΠΤΡΙΚΑ ΕΙΔΩΛΑ αλλά ΜΗ ταυτόσημα και δεν μπορούν να υπερτεθούν.

Κάτοπτρο πίσω



Κάτοπτρο κάτω

ΙΔΙΑ



Κάτοπτρο δίπλα

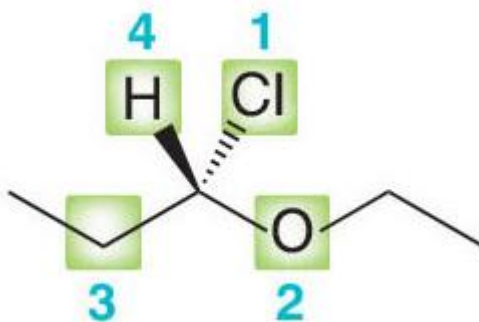
Καθορισμός της Απεικόνισης με το σύστημα Cahn-Ingold-Prelog.

Για την ονομασία των εναντιομερών χρησιμοποιούμε το σύστημα **Cahn-Ingold-Prelog** για να ορίσουμε κάθε μόριο είτε ως *R* είτε ως *S*.



Ζεύγος εναντιομερών

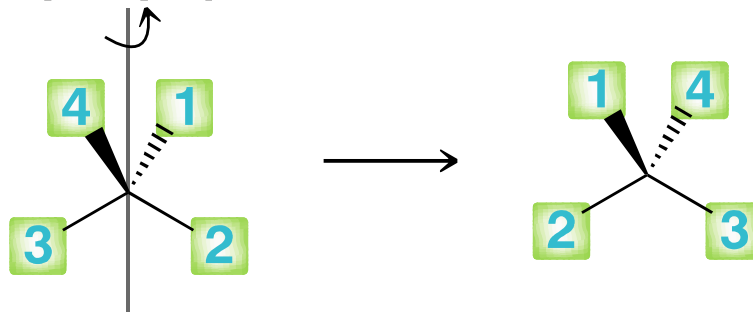
Καθορισμός προτεραιότητας: Άτομα μεγαλύτερου ατομικού αριθμού έχουν τη μεγαλύτερη, ενώ αυτά με το μικρότερο τη χαμηλότερη προτεραιότητα.



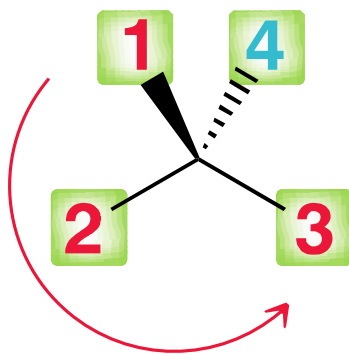
Το σύστημα Cahn, Ingold και Prelog:

1. Χρησιμοποιώντας τους ατομικούς αριθμούς, καθορίζεται η προτεραιότητα των 4 ομάδων που συνδέονται με το χειρόμορφο κέντρο
2. Περιστρέφεται το μόριο στο χώρο έτσι ώστε η ομάδα χαμηλότερης προτεραιότητας να είναι στραμμένη προς τα πίσω
3. Εξετάζεται εάν η σειρά προτεραιότητας των ομάδων 1...2...3 ακολουθεί τη φορά των δεικτών του ρολογιού (δεξιόστροφη) ή την αντίθετη (αριστερόστροφη) φορά
4. Δεξιόστροφη = R και Αριστερόστροφη = S

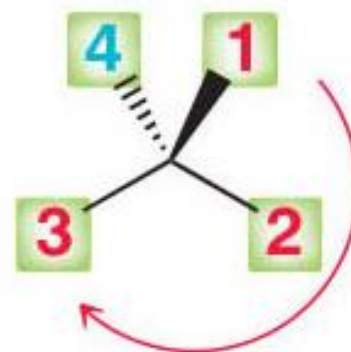
Περιστρέψτε



1...2...3 ακολουθεί την αντίθετη (αριστερόστροφη) φορά των δεικτών του ρολογιού: S



Αριστερόστροφη = S

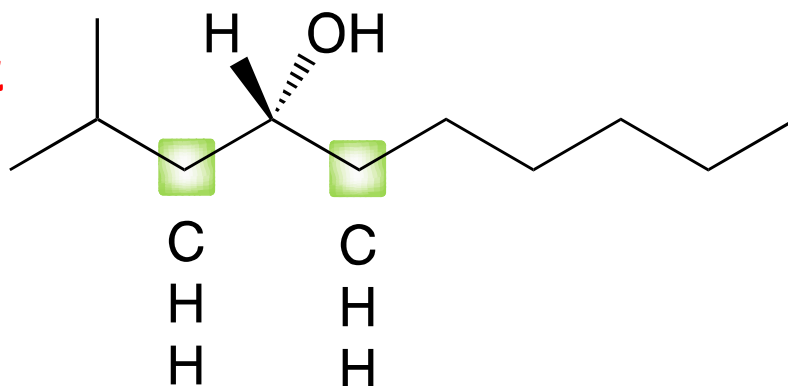


Δεξιόστροφη = R

Καθορισμός προτεραιότητας των τεσσάρων ομάδων

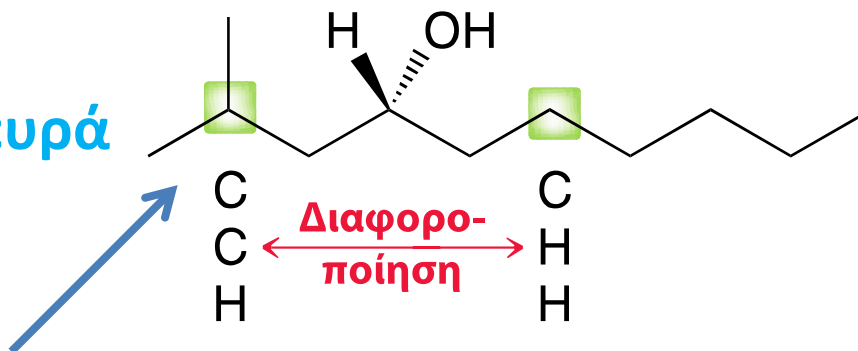
Όταν οι ομάδες που είναι συνδεδεμένες σε ένα χειρόμορφο κέντρο είναι όμοιες, μπορεί να είναι δύσκολο να καθοριστεί η σειρά προτεραιότητάς τους.

Πρώτη πλευρά

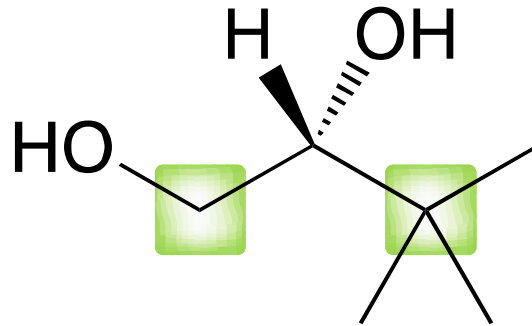


Ισοπαλία

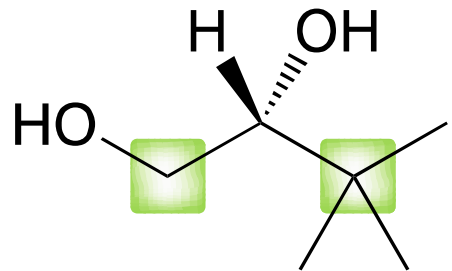
Δεύτερη πλευρά



Προτεραιότητα



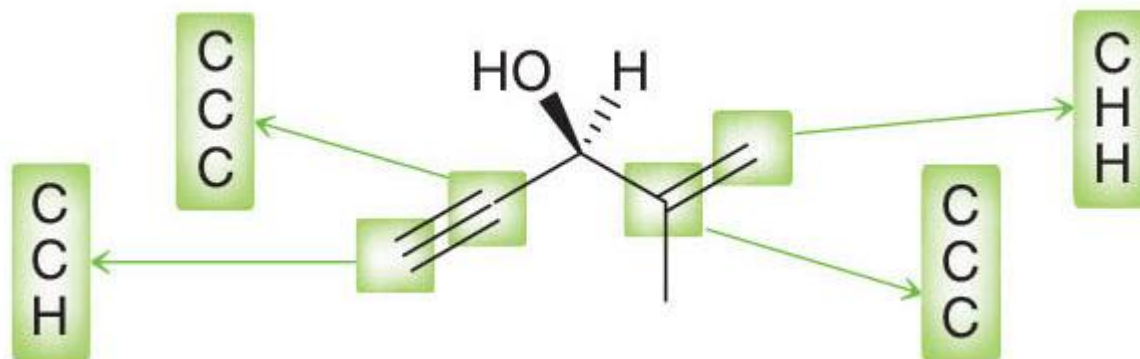
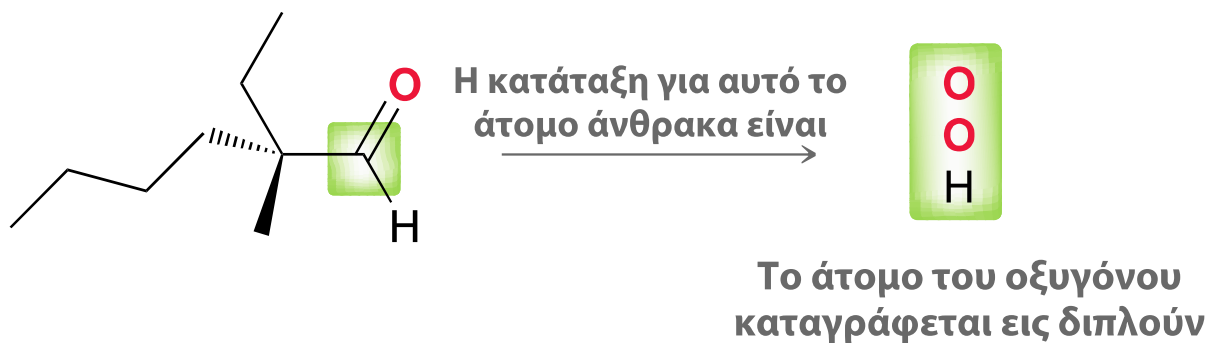
Πρώτη πλευρά



Προτεραιότητα

Η προτεραιότητα βασίζεται στο πρώτο σημείο διαφοροποίησης, ΟΧΙ στο άθροισμα των ατομικών αριθμών.

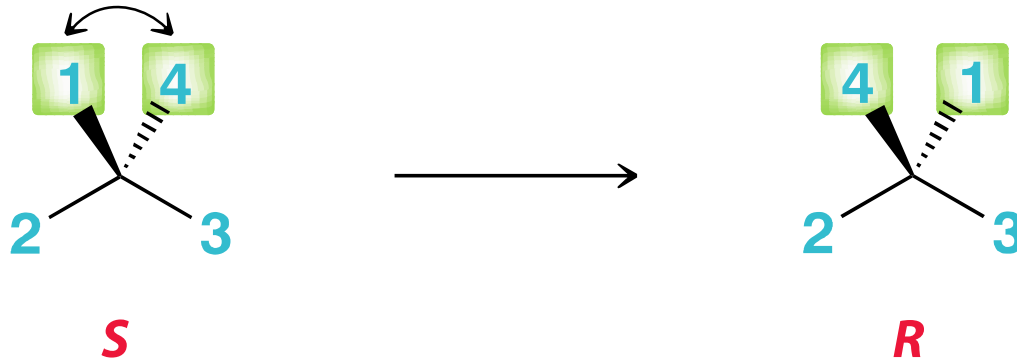
Κατά τον καθορισμό των προτεραιοτήτων στο σύστημα Cahn, Ingold και Prelog, οι διπλοί δεσμοί θεωρούνται ως δύο ξεχωριστοί απλοί δεσμοί.



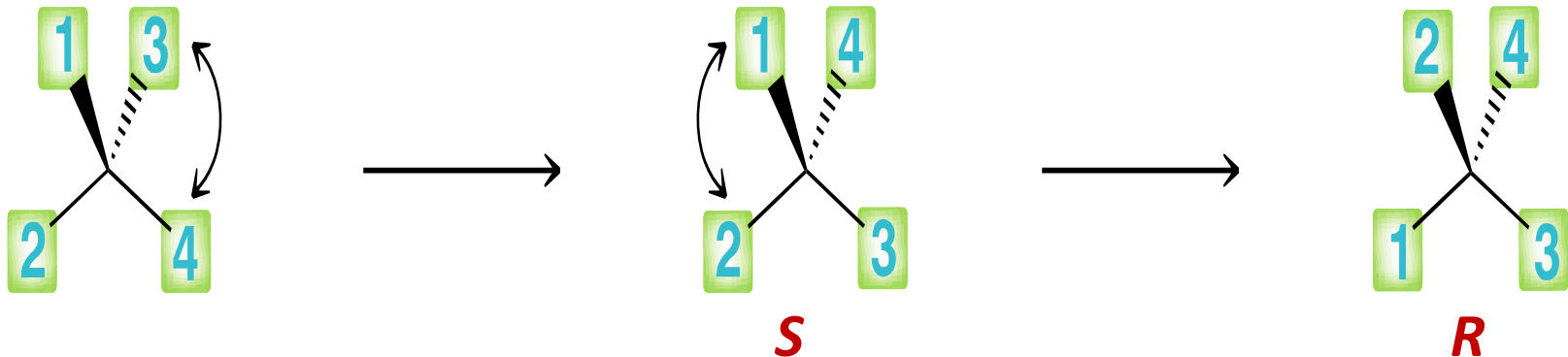
Περιστροφή του μορίου

Για ευκολία περιστροφής του μορίου στο χώρο:

Η εναλλαγή δύο ομάδων σε ένα χειρόμορφο κέντρο θα αναστρέψει την απεικόνιση.



Η εναλλαγή δύο ομάδων για δεύτερη φορά θα αλλάξει και θα επαναφέρει την αρχική απεικόνιση.



ΑΝΑΣΚΟΠΗΣΗ ΤΩΝ ΚΑΝΟΝΩΝ CIPN-INGOLD-PRELOG: ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΗΣ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΗΣ ΕΝΟΣ ΧΕΙΡΟΜΟΡΦΟΥ ΚΕΝΤΡΟΥ

ΒΗΜΑ 1

Αναγνωρίστε τα τέσσερα άτομα που συνδέονται απευθείας με το χειρόμορφο κέντρο.

ΒΗΜΑ 2

Καθορίστε την προτεραιότητα κάθε ατόμου σύμφωνα με τον ατομικό του αριθμό. Ο μεγαλύτερος ατομικός αριθμός λαμβάνει την προτεραιότητα 1 και ο μικρότερος ατομικός αριθμός (συννά ένα άτομο υδρογόνου) λαμβάνει την προτεραιότητα 4.

ΒΗΜΑ 3

Αν δύο άτομα έχουν τον ίδιο ατομικό αριθμό, απομακρυνθείτε από το χειρόμορφο κέντρο αναζητώντας το πρώτο σημείο διαφοροποίησης. Όταν καταγράφετε τη κατάταξή σας, να θυμάστε ότι ένας διπλός δεσμός αντιμετωπίζεται ως δύο ξεχωριστοί απλοί δεσμοί.

ΒΗΜΑ 4

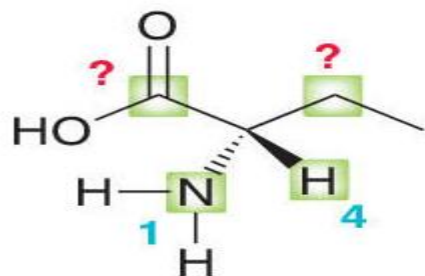
Περιστρέψτε το μόριο ώστε ο υποκαταστάτης προτεραιότητας 4 να βρίσκεται σε διακεκομμένη σφηνοειδή γραμμή (να κατευθύνεται πίσω από το επίπεδο της σελίδας).

ΒΗΜΑ 5

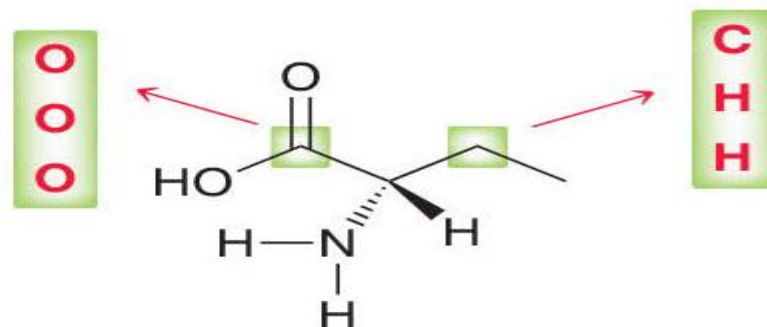
Βρείτε αν η ακολουθία 1-2-3 είναι δεξιόστροφη (*R*) ή αριστερόστροφη (*S*).

ΚΑΘΟΡΙΣΜΟΣ ΤΗΣ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΗΣ ΕΝΟΣ ΧΕΙΡΟΜΟΡΦΟΥ ΚΕΝΤΡΟΥ

ΒΗΜΑ 1 Αναγνωρίστε τα τέσσερα άτομα που συνδέονται με το χειρόμορφο κέντρο και βάλτε τα κατά σειρά προτεραιότητας.



ΒΗΜΑ 2 Αν δύο (ή περισσότερα) άτομα είναι όμοια, καταγράψτε τους υποκαταστάτες τους και αναζητήστε το πρώτο σημείο διαφοροποίησης.



ΒΗΜΑ 3 Σχεδιάστε ξανά το χειρόμορφο κέντρο καταγράφοντας μόνο τις προτεραιότητες.



ΒΗΜΑ 4 Περιστρέψτε το μόριο, ώστε ο υποκαταστάτης χαμηλότερης προτεραιότητας να βρίσκεται σε διακεκομμένη σφηνοειδή γραμμή.



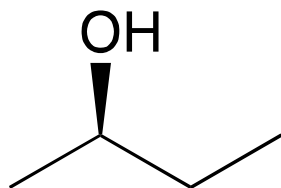
ΒΗΜΑ 5 Καθορίστε την κατεύθυνση της ακολουθίας 1-2-3: δεξιόστροφα είναι *R* και αριστερόστροφα είναι *S*.



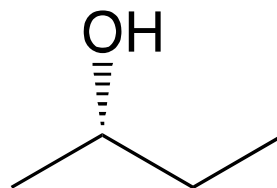
Αριστερόστροφη=S

Καθορισμός της απεικόνισης στην ονοματολογία IUPAC

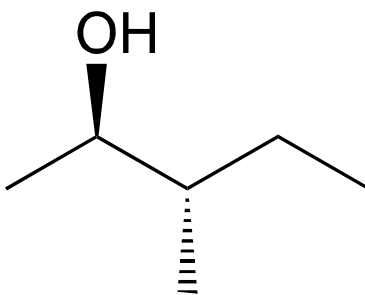
Η *R* ή *S* απεικόνιση χρησιμοποιείται στο όνομα κατά IUPAC ενός μορίου για να το διακρίνει από το εναντιομερές του.



(*R*)-2-Βουτανόλη



(*S*)-2-Βουτανόλη



(*2R,3S*)-3-Μεθυλο-2-πεντανόλη